

「水素貯蔵材料先端基盤研究事業」
中間評価報告書

平成21年10月

独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構

研究評価委員会

平成21年10月

独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構
理事長 村田 成二 殿

独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構
研究評価委員会 委員長 西村 吉雄

NEDO技術委員・技術委員会等規程第32条の規定に基づき、別添のとおり
評価結果について報告します。

目 次

はじめに	1
分科会委員名簿	2
審議経過	3
評価概要	4
研究評価委員会におけるコメント	7
研究評価委員会委員名簿	8
第1章 評価	
1. プロジェクト全体に関する評価結果	1-1
1. 1 総論	
1. 2 各論	
2. 個別テーマに関する評価結果	1-18
2. 1 金属系水素貯蔵材料の基礎研究	
2. 2 非金属系水素貯蔵材料の基礎研究	
2. 3 水素と材料の相互作用の実験的解明	
2. 4 計算科学による水素貯蔵材料の基盤研究	
2. 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	
3. 評点結果	1-33
第2章 評価対象プロジェクト	
1. 事業原簿	2-1
2. 分科会における説明資料	2-2
参考資料1 評価の実施方法	参考資料 1-1

はじめに

独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構においては、被評価プロジェクトごとに当該技術の外部専門家、有識者等によって構成される研究評価分科会を研究評価委員会によって設置し、同分科会にて被評価対象プロジェクトの研究評価を行い、評価報告書案を策定の上、研究評価委員会において確定している。

本書は、「水素貯蔵材料先端基盤研究事業」の中間評価報告書であり、第18回研究評価委員会において設置された「水素貯蔵材料先端基盤研究事業」（中間評価）研究評価分科会において評価報告書案を策定し、第23回研究評価委員会（平成21年10月29日）に諮り、確定されたものである。

平成21年10月
独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構
研究評価委員会

「水素貯蔵材料先端基盤研究事業」

中間評価分科会委員名簿

(平成21年7月現在)

	氏名	所属、役職
分科会長	もりなが まさひこ 森永 正彦	名古屋大学大学院 工学研究科 マテリアル理工学専攻 教授
分科会長 代理	おしま まさはる 尾嶋 正治	東京大学大学院 工学系研究科 応用化学専攻 教授
委員	さかきだ あきひろ 榊田 明宏	日産自動車株式会社 総合研究所 燃料電池研究室 主任研究員
	たけした ひろゆき 竹下 博之	関西大学 化学生命工学部 化学・物質工学科 准教授
	たけだ さだむ 武田 定*	北海道大学大学院理学研究院 化学部門 物理化学分野 教授
	にしみや のぶゆき 西宮 伸幸	日本大学 理工学部 物質応用化学科 教授
	よしなり おさむ 吉成 修	名古屋工業大学大学院 工学研究科 物質工学専攻 物性分野 教授

敬称略、五十音順

注*：実施者の一部と同一大学の所属であるが、部署が異なるため（実施者：北海道大学 大学院工学研究科 材料科学専攻）、「NEDO 技術委員・技術評価委員規程(平成21年7月15日改正)」第34条（評価における利害関係者の排除）により、利害関係はないとする。

審議経過

- 第1回 分科会（平成21年7月23日、24日）
 - 公開セッション
 - 1. 開会、分科会の設置、資料の確認
 - 2. 分科会の公開について
 - 3. 評価の実施方法について
 - 4. 評価報告書の構成について
 - 5. プロジェクトの概要説明
 - 非公開セッション
 - 6. プロジェクトの詳細説明
 - 7. 全体を通しての質疑
 - 公開セッション
 - 8. まとめ・講評
 - 9. 今後の予定、その他、閉会

- 現地調査会（平成21年7月23日）
 - 高エネルギー加速器研究機構（茨城県那珂郡東海村）

- 第23回研究評価委員会（平成21年10月29日）

評価概要

1. 総論

1) 総合評価

燃料電池自動車をはじめとする運輸関係の燃料多様化を実現するためには、水素利用の道を切り開くことは重要である。とりわけ、安全・簡便・効率的かつ低コストの水素貯蔵材料技術の確立が強く望まれている。本事業は、そのための基盤科学技術を扱っており、世界的に見ても同等なプロジェクトはほとんどなく、その存在意義は大きい。特に、本事業で立ち上げている中性子実験装置（NOVA）は世界的な新規装置であり、今後この装置による水素貯蔵材料の優れた研究成果が期待される。本事業のように民間企業では実施できない大規模で高度な開発は、国やNEDOの関与が必須である。個々のグループでは、それぞれ世界的にも注目される成果を出しつつあり、高く評価できる。また、水素貯蔵容器への適用を想定した新規物質の可能性に関する研究は、世界的に見てもトップクラスのものである。さらに、これらの物質の水素貯蔵特性を評価するために開発された種々の評価法や技術も世界をリードするものである。しかしながら、グループ間の連携によって得られた成果が現時点では見えにくい。計算科学グループと実験グループとの連携という意味では、必ずしも効果を上げているとは言い難い。研究グループ間のより密接な連携が課題である。

2) 今後に対する提言

本研究は先端基盤研究ではあるものの、エネルギー・環境問題の重要性を考えると、さらに加速すべきである。本事業で研究された種々の新規水素貯蔵材料について、実用化に際しての指針や問題点等の具体的な利用法を産業界に明確に示すことが好ましい。水素貯蔵材料の開発指針を早期に提示し、この分野の実用研究の加速化を図ってほしい。また、中間評価の現段階では、まだ5つのサブグループの相関、シナジー効果などが若干弱い。研究テーマ間の連携により水素貯蔵メカニズムの解明を進めることにより、ブレークスルーが期待できるため、最終段階に向けてお互いの協調体制をさらに強めて進めてほしい。さらに、NEDOの他の水素関連事業を含む国内の水素関連事業の研究者間との連携が望まれる。このほか、基本特許を申請できる可能性もあるため、知財の取得についても積極的に取り組んでほしい。今後は、日本の国際競争力の強化のための研究現場での人材育成の強化が必要である。本プロジェクトの実施を通して、水素貯蔵材料分野の人材育成が促進されることを期待したい。

2. 各論

1) 事業の位置付け・必要性について

高性能な水素貯蔵材料の開発は水素エネルギーシステムの実現・普及を図る上で極めて重要な位置を占めている。本事業は、エネルギーイノベーションプログラムの下で、運輸部門の燃料多様化に資する研究であるのみならず、わが国が水素エネルギー開発において最先端の位置をキープするとともに、環境にやさしい水素社会を実現するために必要な研究であり、事業の目的は妥当で公益性は十分に認められる。中性子線を用いた解析技術の構築等を含む本事業は民間活動のみでは実施が困難であり、この分野の国際貢献にも繋がる研究になることが期待されるため、NEDO の関与は妥当である。さらに、本事業の成果は長期的にエネルギーイノベーションにプラスに作用することが期待できる。また、エネルギーや環境問題において国際的な枠組みが変わろうとしている現在、わが国が国際的な競争で優位に立つという意味で本事業を行う意味は大きい。今後は、NEDO の他の水素関連事業を含む国内の水素関連事業の研究者間との連携が望まれる。

2) 研究開発マネジメントについて

水素貯蔵材料の構造解析、貯蔵原理の基礎解明を行い、水素貯蔵材料の開発指針を求めることは、妥当な研究目標であり、燃料電池車及び水素貯蔵材料のロードマップを基に設定された開発目標の達成時期と内容は、妥当である。プロジェクトリーダーの下で大規模な解析設備を用いて高い専門性を有した研究者が事業を推進し、その成果を研究テーマ間や民間企業で共有、連携するという姿は、NEDO のマネジメントが効果的に発揮されている結果と評価される。また、サブリーダーに若手・中堅を起用するなど、人材育成の面にも配慮した体制になっている。しかしながら、基礎研究成果から水素貯蔵材料の開発指針を求める最終目標の間には、依然、ギャップがあるように思える。現在行われている5つのグループの成果をまとめるだけでは、この目標を達成することは必ずしも容易ではないかもしれない。プロジェクト全体としての総括的な成果を挙げるために個々の研究グループが果たすべき役割や、ある研究グループを他のグループがどのようにサポートするのかが見えにくい。計算科学グループを含めた研究グループ間のより密接な連携が必要である。また、事業の成果を具体的な形で産業界に提示するという点が不透明であるので、これを実現するような方法や体制を検討してほしい。

3) 研究開発成果について

本事業は概ね計画通りに進んでおり、それぞれの研究グループが、かなりハ

ードルの高い目標に対してほぼ目標を達成している。水素貯蔵材料としての新規な物質の提案、高度な材料作製装置や評価装置の開発という点に関して世界最高水準にあることは明らかである。成果の普及も公平に広く行われている。

ただし、研究グループ間の連携を通して得られた成果が見えにくいのが残念である。まだ中間点ではあるが、計算科学グループと実験グループとの連携という意味では効果を上げているとは言にくい。また、新規水素貯蔵材料の開発指針に関して、産業界へどの程度具体的な指針を示すことができるか現時点では明確ではない。本事業で研究された種々の物質について、実用化に際しての指針や問題点等の具体的な利用法を示すことが好ましい。水素貯蔵能力5～6質量%以上を実現する道筋がやや見えにくい。さらに、基本特許を申請できる可能性もあるため、知財の取得も積極的に行うべきである。中性子グループ以外では、挑戦的なテーマがあまり扱われていないようにも思える。また、水素貯蔵材料の実用化を考えた場合、反応触媒が必ず問題になる。触媒研究がこの事業であまり取り扱われていないのは気になる。

4) 実用化の見通しについて

基礎的研究であるというプロジェクトの性格上、出口イメージやマイルストーンを明確にしづらいものであるが、水素貯蔵材料の開発指針を提供するという最終目標と実用化への出口イメージは明確であり、それが達成できれば産業界における水素貯蔵材料の実用化が進み、本プロジェクトの成果の将来的波及効果が期待できる。

また、研究に参画している実施者にも若手の研究者が多く含まれ、研究グループのリーダーに若手や中堅を配するなど、将来の水素貯蔵材料の研究開発やマネジメントに携わる人材の育成にも配慮しており、人材育成にも波及効果が大きいと考えられる。今回の中間評価では水素貯蔵材料の開発指針については、その取りまとめの方向性が示されたが、今後、産業界でこれらの材料の実用化を加速するためには、産業界のニーズとマッチすべく、企業の開発技術者とのかなり突っ込んだ議論が必要となる。プロジェクトの実施を通して、水素貯蔵材料分野の人材育成が促進されることを期待したい。

研究評価委員会におけるコメント

第23回研究評価委員会（平成21年10月29日開催）に諮り、了承された。研究評価委員会からのコメントは特になし。

研究評価委員会

委員名簿（敬称略、五十音順）

職 位	氏 名	所 属、役 職
委員長	西村 吉雄	学校法人早稲田大学大学院 政治学研究科 (科学技術ジャーナリスト養成プログラム) 客員教授
委員長 代理	吉原 一紘	オミクロンナノテクノロジージャパン株式会社 最高顧問
委員	安宅 龍明	オリンパス株式会社 新規中核事業企画本部 ヘルスケア事業開発部 企画グループ コーディネーター
	伊東 弘一	学校法人早稲田大学 理工学術院総合研究所 客員教授（専任）
	稲葉 陽二	日本大学 法学部 教授
	大西 優	株式会社カネカ 顧問
	尾形 仁士	三菱電機エンジニアリング株式会社 取締役社長
	小林 直人	学校法人早稲田大学 研究戦略センター 教授
	小柳 光正	国立大学法人東北大学大学院 工学研究科 バイオロボティクス専攻 教授
	佐久間一郎	国立大学法人東京大学大学院 工学系研究科 精密機械工学 精密機械工学専攻 教授
	菅野 純夫	国立大学法人東京大学大学院 新領域創成科学研究科 メディカルゲノム専攻 教授
	富田 房男	放送大学 北海道学習センター 所長
	架谷 昌信	愛知工業大学 工学機械学科 教授・総合技術研究所所長
宮島 篤	国立大学法人東京大学 分子細胞生物学研究所 教授	

第1章 評価

この章では、分科会の総意である評価結果を枠内に掲載している。なお、枠の下の「○」「●」「・」が付された箇条書きは、評価委員のコメントを原文のまま、参考として掲載したものである。

1. プロジェクト全体に関する評価結果

1. 1 総論

1) 総合評価

燃料電池自動車をはじめとする運輸関係の燃料多様化を実現するためには、水素利用の道を切り開くことは重要である。とりわけ、安全・簡便・効率的かつ低コストの水素貯蔵材料技術の確立が強く望まれている。本事業は、そのための基盤科学技術を扱っており、世界的に見ても同等なプロジェクトはほとんどなく、その存在意義は大きい。特に、本事業で立ち上げている中性子実験装置 (NOVA) は世界的な新規装置であり、今後この装置による水素貯蔵材料の優れた研究成果が期待される。本事業のように民間企業では実施できない大規模で高度な開発は、国や NEDO の関与が必須である。個々のグループでは、それぞれ世界的にも注目される成果を出しつつあり、高く評価できる。また、水素貯蔵容器への適用を想定した新規物質の可能性に関する研究は、世界的に見てもトップクラスのものである。さらに、これらの物質の水素貯蔵特性を評価するために開発された種々の評価法や技術も世界をリードするものである。しかしながら、グループ間の連携によって得られた成果が現時点では見えにくい。計算科学グループと実験グループとの連携という意味では、必ずしも効果を上げているとは言い難い。研究グループ間のより密接な連携が課題である。

〈肯定的意見〉

- 輸送機搭載水素貯蔵容器用の新材料開発の基盤を整備していこうとする本事業の目的は、世界的なエネルギー戦略を展開する上でわが国の地位を向上するために非常に重要である。また本事業で得られつつある新規物質の水素貯蔵容器としての可能性に関する成果は世界的に見てもトップクラスのものであるとともに、これらの物質の水素貯蔵特性を評価するために開発された種々の評価法や技術も世界をリードするものである。これらの新規物質や新技術は、今後産業界において新しい水素貯蔵材料を開発する上で十分な意欲を引き出すものとなると予想される。
- 水素貯蔵材料開発に向けた基盤研究プロジェクトとしてオールジャパンでベストの研究者を集め、優れたリーダーシップのもとで着実に成果が出つつある。中性子散乱、放射光 X 線回折などの解析技術を駆使して、また計算科学の手法も用いて新しい金属系、非金属系の材料開発を行おうとするもので、平成 23 年度の最終目標をクリアする成果が期待出来る。
- CO₂削減のために燃料電池車の普及は重要な位置づけを占めている。普及のために大きな課題である水素貯蔵技術の革新が期待される中で、本事業のように民間企業では実施できない大規模で高度な開発は、国や NEDO

の関与が必須である。本事業により水素貯蔵材料の開発指針が提示されることで、民間企業での開発も加速し、欧米等の水素貯蔵技術の先端国に比べても十分な競争力を持ち、燃料電池車の普及、水素エネルギー社会への移行において、日本はリーダーになれると評価できる。

- 個々のグループでは、それぞれ世界的にも注目される成果を多数挙げており、高く評価できる。プロジェクトを効率的に進める上で必要な体制や研究グループ間の連携や情報の共有などについてもよく考慮されており、プロジェクトの仕組みが進化したという印象を受けた。
- 5つのサブグループ内では、それぞれの研究は進展しており、各グループの中間研究目標はおおむね達成されているといえる。この「水素貯蔵材料先端基盤研究事業」の中で金属系から非金属系をはじめとする様々な材料に吸蔵された水素の吸蔵状態や吸蔵・放出に伴う材料の構造変化および水素位置の空間相関を解明することは、各々の水素吸蔵材料の特質を最大限に引き出し、物質開発のブレークスルーを引き起こすと考えられる。これを達成するための中心的装置になると考えられる「中性子全散乱装置 NOVA」も順調に完成に近付いており、このプロジェクト後半の大いなる研究展開が期待できる。
- 燃料電池自動車をはじめとする運輸関係の燃料多様化を実現するためには、水素利用の道を切り開くことは重要である。とりわけ、安全・簡便・効率的かつ低コストの水素貯蔵材料技術の確立が強く望まれている。本事業は、そのための基盤科学技術を扱っており、世界的に見ても同等なプロジェクトはほとんどなく、その存在意義は大きい。特に、本事業で立ち上げている中性子実験装置 (NOVA) は世界的な新規装置であり、今後この装置による水素貯蔵材料の優れた研究成果が期待される。一方、事業全体としてのパフォーマンスをさらに高めるため、各テーマ同士の連携を一層高めるとともに、他の NEDO 事業 (とりわけ水素製造・輸送・貯蔵システム等技術開発事業) 及び事業外の研究者等との交流や討論が必要である。また、若手研究者の育成も重要である。
- 組織も人材もこれ以上を望めない体制であり、中間段階において良いチームに成長している。*in-situ* 中性子散乱装置, SPring-8, ポジトロン CDB など、世界最先端に位置している。 AlH_3 , AB_2-AB_5 サンドイッチなど、材料的にも興味深い物が出て来はじめた。水素社会が来るとすればこの事業の延長線上に来る。

〈問題点・改善すべき点〉

- 水素社会が来たとき、そこで使われている材料はこの事業で得られた開発

指針に基づいて作られたものだと認識されているかどうか。この事業が知の基盤を厚くし、研究者の発想を刺激することは疑いないが、成果が一般的過ぎて成果と認識されないおそれがある。具体的な材料として結実する方策を今から採るべきである。

- これまで挙げた成果は素晴らしいものであるが、水素貯蔵技術ロードマップの達成に向けての時間的な余裕を考えた場合、研究のさらなる加速が必要と考えられる。グループ間の連携により得られた成果が現時点では見えにくく、その PR の仕方も含めて検討が必要と考えられる。
- プロジェクト開始から中盤ということもあるかもしれないが、グループ間の密接な連携によって生まれると思われる「相乗効果による飛躍的研究展開」が、少なくとも現段階ではあまり見受けられないように思われる。さまざまな物質系の可能性の探索もちろん重要であるが、理論計算を含めた様々な研究手段(手法)を持つこのプロジェクトでは、各グループの様々な向きを向いたベクトルを一つの向きに向けるための核となるような物質系の策定も、プロジェクト後半に向けて必要と考えられる。また、他の物質開発プロジェクトとの密接な連携も必要と思われる。これは、今後に対する提言でもある。
- 得られている成果や開発されつつある技術は非常に高度でかつ詳細なものであるので、かえって「新材料を開発する」という大きな目標に対してどのような位置にあるのかが見えにくくなっているきらいがある。
- 論文は 59 件発表しているが、基礎研究といえどもロードマップに則って実用化を目指した研究を効率的に進めるべきであるので、特許 3 件はかなり少ないと思われる。解析分野、計算科学分野で原理解明に繋がる成果が出つつあるが、材料開発では「解析結果のフィードバックで新材料創成」という公式通りにはいかない、のが常である。金属系、非金属系の材料開発ではさらに思い切った着想、開発指針が求められる。

〈その他の意見〉

- ・ 本プロジェクトは「水素貯蔵材料」をターゲットにしているが、ここで開発する解析技術が「水素貯蔵容器」プロジェクトにも貢献出来る成果となり得るか、についても検討されると広がりのある成果になると考えられる。
- ・ 水素社会の到来が少し先送りになったという見方が広がっている。**Departure from Basic** を意識した将来プランを開示して、産業界を牽引してほしい。

2) 今後に対する提言

本研究は先端基盤研究ではあるものの、エネルギー・環境問題の重要性を考えると、さらに加速すべきである。本事業で研究された種々の新規水素貯蔵材料について、実用化に際しての指針や問題点等の具体的な利用法を産業界に明確に示すことが好ましい。水素貯蔵材料の開発指針を早期に提示し、この分野の実用研究の加速化を図ってほしい。また、中間評価の現段階では、まだ5つのサブグループの相関、シナジー効果などが若干弱い。研究テーマ間の連携により水素貯蔵メカニズムの解明を進めることにより、ブレークスルーが期待できるため、最終段階に向けてお互いの協調体制をさらに強めて進めてほしい。さらに、NEDOの他の水素関連事業を含む国内の水素関連事業の研究者間との連携が望まれる。このほか、基本特許を申請できる可能性もあるため、知財の取得についても積極的に取り組んでほしい。今後は、日本の国際競争力の強化のための研究現場での人材育成の強化が必要である。本プロジェクトの実施を通して、水素貯蔵材料分野の人材育成が促進されることを期待したい。

〈今後に対する提言〉

- ・ グループ間の情報交換や議論は頻繁に行われているようであるが、マンネリ化を避けるためにも、連携によって達成すべき目標・指針を明確にし、目標達成に各グループが取り組むしくみを作るべきではないかと考える。連携によって得られた成果についても個々のグループの評価とは別に評価を受ける仕組みを作ってもよいのではないかと考える。
- ・ 本研究は先端基盤研究ではあるものの、エネルギー・環境問題の重要性を考えると、研究はさらに加速すべきであると考えられる。水素貯蔵材料の開発指針を早期に提示し、この分野の実用研究の加速化に是非貢献してもらいたい。
- ・ 中間評価の段階では、まだ5つのサブグループの相関、シナジー効果などが若干弱いように思われるので、最終段階に向けてお互いの協調体制をさらに強めて進めてほしい。
- ・ 「中性子全散乱装置 NOVA」の威力を最大限に発揮するためには、もちろん中性子線源である加速器の安定運転と、強度の増大が必要であるが、この点は本プロジェクトとは別次元の問題でもある。このプロジェクト後半では、中性子ビーム強度および加速器の運転状況に柔軟に対応して、最大限の効果を得るような策を講じるべきであろう。
- ・ 水素貯蔵材料はニッケル水素電池として既に実用化されている。この分野の合金を *in-situ* 解析し、材料を高度化するニーズも存在するはずである。燃料電池自動車の実用化時期が遠のいたように見える今、産業界を水素関

連分野に引きとめておくためにも、幅広い利用形態の水素貯蔵材料を研究対象とするほうが良いのではないか。

- 各グループの成果はたいへん優れているものであり、それ自体で本事業の目的を十分に達成できるものと思われるが、欲を言えば連携をさらに強化することにより、本事業でしか得られないようなすばらしい（ブレークスルー的な）成果を挙げることを期待している。また、本事業で得られた成果はかなり高度なものであるので、産業界に対して開発の指針を提示するという意味からもできるだけわかりやすい形で産業界に提示する方法を探してほしい。
- 5つの研究テーマ間の連携により水素貯蔵メカニズムの解明を進めることで、ブレークスルーが期待できる。本事業を着実に実施し目標値を達成することで、水素貯蔵材の開発は加速できる。本事業の成果をタイムリーに公開し、民間企業との更なる技術交流を期待する。

〈その他の意見〉

- 計算科学をサブグループとして入れたのは慧眼だったか、時期尚早だったか。慧眼だとするならば、高名な研究者が行って定評のある研究成果を叩き潰すくらいの気概を計算科学グループに求めたい。たとえば、Gupta や Switendick らの合金設計理論は今でも通用するのか、それとも誤りに満ちたものだったのか。開発指針という以上、後付けの理屈では意味が無い。予言の正当性を主張するためにも是非闘ってほしい。

1. 2 各論

1) 事業の位置付け・必要性について

高性能な水素貯蔵材料の開発は水素エネルギーシステムの実現・普及を図る上で極めて重要な位置を占めている。本事業は、エネルギーイノベーションプログラムの下で、運輸部門の燃料多様化に資する研究であるのみならず、わが国が水素エネルギー開発において最先端の位置をキープするとともに、環境にやさしい水素社会を実現するために必要な研究であり、事業の目的は妥当で公益性は十分に認められる。中性子線を用いた解析技術の構築等を含む本事業は民間活動のみでは実施が困難であり、この分野の国際貢献にも繋がる研究になることが期待されるため、NEDO の関与は妥当である。さらに、本事業の成果は長期的にエネルギーイノベーションにプラスに作用することが期待できる。また、エネルギーや環境問題において国際的な枠組みが変わろうとしている現在、わが国が国際的な競争で優位に立つという意味で本事業を行う意味は大きい。今後は、NEDO の他の水素関連事業を含む国内の水素関連事業の研究者間との連携が望まれる。

〈肯定的意見〉

- 本事業は、地球上の二酸化炭素の急増を抑えるためのいくつかのクリーンエネルギー源の一つとしての水素利用に関わる「水素貯蔵材料」の研究開発基盤の構築と実用化への確たる指針の構築であり、ほかのクリーンエネルギー開発との効率良いバランスを取ることが重要である。また、流動的な世界情勢との関係も重要である。これらのことから、NEDO の関与は必要と考えられ、また国内のみならず地球規模の協力・連携も必要であり、さらに政策への提言も必要と考えられる。
- 本事業は、エネルギーイノベーションプログラムの下で、運輸部門の燃料多様化に資する研究であるのみならず、環境にやさしい水素社会実現のために必要な研究であり、公益性は十分に認められる。内容は水素貯蔵材料の先端技術基盤の研究であるため、民間活動のみでは実施・達成が困難である。また、この分野の国際貢献にも繋がる研究になることが期待される。このような観点から、NEDO の関与は妥当である。現在、5つの研究開発項目で研究が進められているが、個々の研究分野や研究規模は水素研究全体から考えるとさほど大きくない。研究を加速するためにも、NEDO の他の水素関連事業を含む国内の水素関連事業の研究者間との連携が望まれる。また、優れた研究装置が開発されているので、できるだけ早い時期に、装置の公開が望まれるかもしれない。
- CO₂削減のために燃料電池車の普及は重要な位置づけを占めている。普及

のために大きな課題である水素貯蔵技術の革新が期待される中で、本事業は必須であると考ええる。例えば、民間企業では実施できない中性子線を用いた解析技術の構築等はまさに国家プロジェクトにふさわしい。大規模な解析設備を用いて高い専門性を有した研究者が事業を推進し、その成果を研究テーマ間や民間企業で共有、連携するという姿は、NEDO のマネジメントが効果的に発揮されている結果と評価できる。本事業により、水素貯蔵材料の開発指針が提示されることが期待できる。本事業の目的を達成すれば、欧米等の水素貯蔵技術の先端国に比べても十分な競争力を持ち、燃料電池車の普及、水素エネルギー社会への移行において、日本はリーダーになれると評価できる。

- 高性能な水素貯蔵材料の開発は水素エネルギーシステムの実現・普及を図る上で極めて重要な位置を占めている。また、水素貯蔵量などの点でのブレークスルーのため、水素貯蔵材料に関する基礎的研究の必要性が指摘されているところであるが、民間活動のみでは限界があるのも事実である。国際的にみると、我が国は従来水素吸蔵合金の応用を中心に世界をリードする立場であったが、高水素貯蔵容量の無機系材料を中心に欧米などの巻き返しを受けている状況である。このような状況から考えて、本事業は時宜を得た、必要不可欠な事業であると考えられる。
- *in-situ* 解析という分野に革新をもたらしつつあり、これは民間活動のみでは達成不能である。長期的にエネルギーイノベーションにプラスに作用することは間違いない。ヒト・モノ・カネがこれだけ揃った事業でどこまでやれるか、この成否によって水素社会の実現性が明確に判断できる。戦力逐次投入では不可能な明確な解に達することができる。万一水素社会が否定されたとしても、インフラと人材は後世のために活用できる。
- エネルギーや環境問題において国際的な枠組みが変わろうとしている現在、わが国が国際的な競争で優位に立つという意味で本事業を行う意味は大きい。特に、今回の事業はこの分野において世界をリードする研究者を集め新材料を探求していこうとするものであり、民間活動のみでは達成できないものである。また、世界的に見ても最先端の研究装置が整備されつつあり、わが国が水素エネルギー開発において最先端の位置をキープする上でも本事業は必要であり、予算規模以上の成果が得られつつある。
- 当該施策・制度の目標達成のために大いに寄与している。NEDO の関与がないと実現し得ないプロジェクトで、いいチームになっている。予算対効果は十分である。事業の目的は妥当である。

〈問題点・改善すべき点〉

- **Back to Basic** という言い方だと、産業界から見ると商機が遠のいたと写るのではないか。*in-situ Analysis Aided Development* といった表現を用い、短期的にも民間を刺激したほうがよい。「それがわかったら何ができるか」ということが厳しく問い詰められていない。わかっていたが、わかっていた時にはできなかったことが、わかったことによってできるようになる、そういう事例は世の中に多くないのではないか。わかっていたなくてもインスピレーションがひらめいてやってみたら成功した、という事例は多い。**Departure from Basic** をどこでどう仕掛けるか、考えておく必要がある。知が集積すればおのずとブレークスルーにいたるという考えを否定しないが、この場所でブレークスルーを起こすのを目標とするならば、他の事業と早期に連携すべきである。
- 新規材料開発のための基本原理を解明しその基盤となる技術を整備する点は評価できるが、それを新材料の開発指針として産業界へ提案する点において、どの程度具体的な指針を示せるかについて今のところ明らかではない。
- 若干基礎研究に偏っているきらいはあるが、後半の展開に期待したい。
- 本事業そのものは「水素貯蔵材料先端基盤研究事業」に限定されているが、そもそももっと大きな目標は、人類が生き延びるために地球環境を損なわないようにエネルギー利用をすることと信じる。研究開発基盤の構築と実用化への確たる指針の構築のためには、研究開発を通じての現場における人材育成も切り離して考えることはできない。これは日本の国際競争力の強化にもつながる。これら一連の流れや関係をもっと強く意識した事業展開も必要と思う。

〈その他の意見〉

- ・ 水素社会が本当に来るのか来ないのか、当面は燃料電池車の成否にかかっている。高圧水素タンクを超える技術を開発するには、実用的な「P-T ウィンドウ」を設定した枠内で水素吸蔵量をここまで増やす、という目標が最重要である。水素貯蔵技術のブレークスルーの第一は水素貯蔵量の飛躍的向上であるべきだと考える。しかし、長い目で見ると、こうした固定観念を打ち破った上でブレークスルーを起こす若手研究者に期待すべきかもしれない。人材育成面で多大の貢献をする事業であることは疑いない。
- ・ NEDO や他省庁の各事業ごとの分担も必要ではあるが、完全に縦割りになってしまわないような、効率的連携をさらに進めるべきと思う。

2) 研究開発マネジメントについて

水素貯蔵材料の構造解析、貯蔵原理の基礎解明を行い、水素貯蔵材料の開発指針を求めることは、妥当な研究目標であり、燃料電池車及び水素貯蔵材料のロードマップを基に設定された開発目標の達成時期と内容は、妥当である。プロジェクトリーダーの下で大規模な解析設備を用いて高い専門性を有した研究者が事業を推進し、その成果を研究テーマ間や民間企業で共有、連携するという姿は、NEDO のマネジメントが効果的に発揮されている結果と評価される。また、サブリーダーに若手・中堅を起用するなど、人材育成の面にも配慮した体制になっている。しかしながら、基礎研究成果から水素貯蔵材料の開発指針を求める最終目標の間には、依然、ギャップがあるように思える。現在行われている5つのグループの成果をまとめるだけでは、この目標を達成することは必ずしも容易ではないかもしれない。プロジェクト全体としての総括的な成果を挙げるために個々の研究グループが果たすべき役割や、ある研究グループを他のグループがどのようにサポートするのが見えにくい。計算科学グループを含めた研究グループ間のより密接な連携が必要である。また、事業の成果を具体的な形で産業界に提示するという点が不透明であるので、これを実現するような方法や体制を検討してほしい。

〈肯定的意見〉

- 目標を構成する項目は基礎科学として明確である。サブグループが手法別のものと材料別のものから構成されており、分野に漏れが無い。高度な研究機関および卓越した人材が集結している。他のプロジェクトとの連携および研究成果の公開など、オープンな運営が行われている。
- 産業界等に副産物として既にある水素ガスを利用するという立場から、水素をより安全かつ効率的に貯蔵できる物質開発の根本的指針を与えるための基盤研究を目標とするところは、現時点での社会情勢からみて妥当な戦略的目標設定と考えられる。またこの目標を達成するために、計算科学グループも含めたことは妥当と思われる。
- 水素貯蔵材料の構造解析、貯蔵原理の基礎解明を行い、水素貯蔵材料の開発指針を求めることは、妥当な研究目標であり、評価できる。研究開発計画もはっきりと設定されている。また、水素貯蔵材料の開発指針を得るための、水素吸蔵量、水素化物安定性、反応速度、耐久性へのアプローチも妥当である。世界有数の中性子実験装置（NOVA）の設置とそれによる今後の構造解析にも期待できる。
- 研究開発目標、計画、事業体制とも十分な妥当性がある。
- 燃料電池車及び水素貯蔵材料のロードマップを基に設定された開発目標

の達成時期と内容は、妥当と考える。開発内容の水素吸蔵量・水素化物の安定性・耐久性・反応速度は、車載用を考える上で最も重要な要素である。本事業を進める上で、産総研・秋葉 PL を中心に、5つの分野のサブリーダー間の連携を深めるという効率的な体制と評価できる。

- サブリーダーに若手・中堅を起用するなど、人材育成の面にも配慮した体制になっている。個々の研究グループの研究開発計画については概ね妥当と考えられる。
- 全体的にみて、適切な開発マネジメントがなされているといえる。特に強力なプロジェクトリーダーのもとで、世界をリードする研究者が集まっている研究体制はすばらしい。

〈問題点・改善すべき点〉

- しかしながら、基礎研究成果から水素貯蔵材料の開発指針を求める最終目標の間には、依然、ギャップがあるように思える。現在行われている5つのグループの成果をまとめるだけでは、この目標を達成することは必ずしも容易ではないかもしれない。この点について各グループの中での議論はもちろんのこと、全実施者の中での議論が必須である。研究結果が開発指針として集約されるのではなく、並列的な研究結果のみが出てくることを恐れる。
- それぞれの実施者の意識レベルの問題かもしれないが、プロジェクト全体としての総括的な成果を挙げるために個々の研究グループが果たすべき役割や、連携面においてある研究グループを他のグループがどのようにサポートするのか、といったことが見えにくい。組織として縦の部分はよく機能しているが、横の連携の部分では改善の余地があるという印象を受ける。情報交換や議論の場は頻繁に設けているようでその点は好ましいが、今後は、そこから具体的な成果が挙がるよう改善を進めていただきたい。クラスハイドレートやMOFに関するシミュレーション探索研究の成果を実証するための研究体制が必要なように思われ、未整備であるなら検討してはどうかと考える。
- 事業の成果を、具体的な形で産業界に提示するという点が不透明であるので、これを実現するような方法や体制を検討していただきたい。
- 得られつつある研究成果について、さらに5グループ内の連携を密にして、シナジー効果でさらにすばらしい成果（Nature 級）をねらってほしい。
- グループ分けについて、特に「金属系」と「非金属系」については、吸蔵メカニズムの違いとそれぞれを担当する研究者の専門分野あるいは得意分野の背景に基づくとと思われるが、より密接な連携が必要と考えられると

同時に「金属系 G」「非金属系 G」「物性 G」の役割分担が将来の実用化に向けて、効率的であるかどうか、疑問もある。さらに、計算科学グループとの密接な連携が必要と考えられる。

- 構造解析および貯蔵原理の基礎解明ができれば何ができるか、という問いに対し、水素貯蔵材料の開発指針が得られる、と答えるのでは途中が抜けている。たとえば、検討するに足る内容の仮説をどうやって集めるか。権利の保護の問題がつきまとうが、これは避けて通れない。金属系および非金属系と分けているが非金属系グループでも軽金属を対象とした研究がなされている。AlH₃ないし Al 合金の水素化物を何としてでも実用化する、といった目標を掲げ、サブグループの別を越えた連携を進めるべきである。産業界の腰が引け始めていないか。現場のニーズの点検が必要。

〈その他の意見〉

- ・ 知が蓄積されることは疑いない。ブレークスルーが他の場所で起ってもいいのか、何としてもこの場所で起すのか。技術開発指針を成果と位置づけるのは構わないが、目的物を明示しておかないと、物質や材料のブレークスルーが他の場所で起る手伝いをする形になるおそれがある。世のため人のためをめざすと甘くなりがちなので、「欲と二人連れ」になることを薦める。
- ・ 情勢変化への対応等も補正予算対応等適切に実施されている。
- ・ 各グループ間がゆるく連携して互いにより影響をおよぼしあっている点は評価できるが、それだけではなく緊密な連携をすることによってのみ解決できるものも多くあると思われるのでそのような方向の検討もしていただきたい。
- ・ 先端基盤研究であるから、成果は個別研究者の能力に依存するところが大きい。誰を研究実施者に選んだかで、すでに結果の大半が決まっているのかもしれない。PL は、社会情勢変化に対応しながら、適宜、研究者を入れ替えていく程の気概を持って、研究体制の機動性の維持を考えてもらいたい。

3) 研究開発成果について

本事業は概ね計画通りに進んでおり、それぞれの研究グループが、かなりハードルの高い目標に対してほぼ目標を達成している。水素貯蔵材料としての新規な物質の提案、高度な材料作製装置や評価装置の開発という点に関して世界最高水準にあることは明らかである。成果の普及も公平に広く行われている。

ただし、研究グループ間の連携を通して得られた成果が見えにくいのが残念である。まだ中間点ではあるが、計算科学グループと実験グループとの連携という意味では効果を上げているとはいえない。また、新規水素貯蔵材料の開発指針に関して、産業界への程度具体的な指針を示すことができるか現時点では明確ではない。本事業で研究された種々の物質について、実用化に際しての指針や問題点等の具体的な利用法を示すことが好ましい。水素貯蔵能力5～6質量%以上を実現する道筋がやや見えにくい。さらに、基本特許を申請できる可能性もあるため、知財の取得も積極的に行うべきである。中性子グループ以外では、挑戦的なテーマがあまり扱われていないようにも思える。また、水素貯蔵材料の実用化を考えた場合、反応触媒が必ず問題になる。触媒研究がこの事業であまり取り扱われていないのは気になる。

〈肯定的意見〉

- 全体としてほぼ目標を達成している。ただし、中間目標自体が数値化されていないため、主観的評価にならざるを得ない。成果の意義は十分成果的水準に達しているが、最終目標である水素貯蔵能力5～6質量%以上を実現する道筋がやや見えにくい。
- 水素貯蔵材料としての新規な物質の提案、高度な材料作製装置や評価装置の開発という点に関して世界最高水準にあることは明らかである。また、投入された予算に見合った成果が得られている。これらの本事業の成果により新たな物質の探求が加速されることが十分に期待できる。
- 本事業は概ね計画通りに進んでいると思われる。今後とも、成果の普及に努めてほしい。
- 高圧水素下の *in-situ* 解析方法や計算手法を構築し、吸蔵材の構造理解や開発の方向性を示せた。AlH₃ の直接製造の成功とその観察、積層セルの金属格子の変化の解析、CDB 法による欠陥周辺の元素同定、中性子線によるアモルフォスも含めた構造解析技術の構築等いずれも世界トップの成果であり目標値を達成している。本事業の基本に立ち返った貯蔵材料開発は、将来、ブレークスルーをもたらすと評価できる。
- 各研究グループのポテンシャルの高さを感じる。それぞれの研究グループが、かなりハードルの高い目標に対して、それを概ねクリアする、世界的

にも注目される成果を多く挙げており、高く評価したい。

- 中間目標はおおむね達成されていると思われる。「金属系」「非金属系」材料ともに、水素の吸蔵および放出に際し、大きな構造変化を伴うことから、平衡状態以外に、実用化に向けた物質開発の指針を得るためには、非平衡状態および速度論を含めたその場観察から得られる情報が極めて重要と考えられるが、これらの進展は高く評価できる。
- 金属系、非金属系および材料物性のグループで特筆すべき成果が得られている。世界最高水準と言える。建設計画の途上にある中性子散乱グループも順調にキャッチアップしている。他の技術では得られない知見が得られ始めている。成果の普及は公平に広く行われている。

〈問題点・改善すべき点〉

- 技術開発指針を出すことを目標としているため、一見すると特許申請と無縁と思われがちだが、「H-H 距離を○○nm 以下にするための△△型合金構造体」、「○○と△△を積層して○○中の水素が××まで増えても分相しない合金」など、基本特許を申請できる可能性がある。これを追求すべきである。最終目標に向け、開発指針とはどのレベルのものをさすのか、メンバー間の意思統一ないし PL の意思表示が必要である。
- まだ研究がスタートしてから 2 年程度の短期間しかたっていないので仕方がないかもしれないが、先端基盤研究の成果としては、少し物足りない。中性子グループ以外では、挑戦的なテーマがあまり扱われていない。また、水素貯蔵材料の実用化を考えた場合、反応触媒が必ず問題になる。触媒研究がこの事業であまり取り扱われていないのは気になる。
- 本プロジェクトで扱っている「金属系」「非金属系」材料ともに、計算科学的アプローチは容易ではないと思われる。まだ中間点ではあるが、現時点では、実験グループとの連携という意味では効果を上げているとはいえない。さまざまな物質系にアプローチすることも重要であるが、今後本プロジェクトの終盤に向けて、よりの絞ることも必要かと思われる。
- 知財の取得が課題となろう。大学では知財を重要視しない傾向があるため、NEDO 関係者から積極的な助言・指導を行う必要がある。
- 研究グループ間の連携を通して得られた成果が(実際は挙がっているのかもしれないが)見えにくいのが残念である。個々の研究グループのポテンシャルは高いと考えられるだけに、欲張りな意見ではあるが、連携を強化してより包括的な知見が成果として得られれば理想的である。このプロジェクトに参画している実施者にはそれだけのポテンシャルがあると考えられる。

- 本事業で得られた成果を産業界における新材料の開発に対して具体的にどのように生かしていくのかが不明確である。たとえば、本事業で研究された種々の物質について、水素吸蔵量、水素化物の安定性、耐久性、反応速度などを、これらを実用化する際の指針や問題点ともに示すことなどにより、それを明確にすることができると思われる。また、この事業で開発された装置や手法についても、それらの特徴などとともに具体的な利用法を示すことが望ましい。

〈その他の意見〉

- ・ 知的財産権等の取得及び標準化の取組は、適切に実施されている。
- ・ 論文発表、特許などの申請も重要であるが、最終目標を達成に向けて、多くの試みをしていただきたい。中には、理由が分からない結果が出て来るかもしれないが、それを否定的な結果と捉えるのではなく、将来の問題点として肯定的な姿勢で研究に取り組んでもらいたい。
- ・ 計算科学を評価するのは難しい。先行の計算科学上の成果を吟味しなおすとか、先行の実験事実を理論的に解明して見せるとか、他者とのクロスリンクを活発に行い、計算科学が役立つ姿を示してほしい。

4) 実用化の見通しについて

基礎的研究であるというプロジェクトの性格上、出口イメージやマイルストーンを明確にしづらいものであるが、水素貯蔵材料の開発指針を提供するという最終目標と実用化への出口イメージは明確であり、それが達成できれば産業界における水素貯蔵材料の実用化が進み、本プロジェクトの成果の将来的波及効果が期待できる。

また、研究に参画している実施者にも若手の研究者が多く含まれ、研究グループのリーダーに若手や中堅を配するなど、将来の水素貯蔵材料の研究開発やマネジメントに携わる人材の育成にも配慮しており、人材育成にも波及効果が大きいと考えられる。今回の中間評価では水素貯蔵材料の開発指針については、その取りまとめの方向性が示されたが、今後、産業界でこれらの材料の実用化を加速するためには、産業界のニーズとマッチすべく、企業の開発技術者とのかなり突っ込んだ議論が必要となる。プロジェクトの実施を通して、水素貯蔵材料分野の人材育成が促進されることを期待したい。

〈肯定的意見〉

- 基礎的研究であるというプロジェクトの性格上、出口イメージやマイルストーンを明確にしづらいものであるが、それらが比較的明確になっていると思われる。研究に参画している実施者にも若手の研究者が多く含まれ、研究グループのリーダーに若手や中堅を配するなど、将来の水素貯蔵材料の研究開発やマネジメントに携わる人材の育成にも配慮している。その場観察手法の確立に関する成果は、今後の水素貯蔵材料の研究開発に非常に大きく貢献するものと期待される。
- 成果は関連分野へ十分な波及効果が期待できる。人材開発という点では、学生の教育に最適なテーマである。
- 高度な解析技術や計算手法は、産業界にとって重要かつ必要とされているものである。既に開始された共同開発の公募は、技術者の交流を促進させることにおいて有効である。今後提示されることが期待される開発指針により、産業界の開発は加速されると評価できる。
- 水素を新たに発生させることを念頭に置かず、すでに産業界に副産物としてある水素を効率的に吸蔵・放出する物質材料の開発という点では実用化への出口イメージは明確であり、本プロジェクトの成果の将来的波及効果は期待できる。また、中堅および若手研究者をできる限り登用しており、この点では人材育成にも波及効果を及ぼすと考えられる。
- 出口の構成要素は明確になっている。基礎科学である以上、開発指針の提供を目標にするのは良い。水素社会が到来するかどうか、これに決着がつ

けられる。開発指針が現物の合金などを生み出せば水素社会が来る。万一否定的な決着に到ったとしても、科学の基盤が残り、優れた人材が育っている。

- 輸送機搭載用の水素貯蔵容器として種々の新規物質の可能性が有ることを示されており、産業界での新規材料の開発意欲を引き出すために十分な成果をあげつつある。
- 水素貯蔵材料の開発指針を提供するという最終目標は明確であり、それができれば産業界における水素貯蔵材料の実用化が進むので評価する。それだけに、成果に対する期待も大きいので、研究を加速してもらいたい。

〈問題点・改善すべき点〉

- 実用化に向けた道筋が若干見えにくい。企業の開発技術者とのかなり突っ込んだ議論が今後必要となる。学生教育・技術者育成の姿が若干見えにくい。その点の波及効果をさらに追求して頂きたい。
- しかしながら、中間評価ではまだ、水素貯蔵材料の開発指針作成の方向についての報告がなかった。個々のグループ研究はそれなりに自由度を持つべきであるが、研究方向としては、それが全体の最終目標に合致するように配慮していただきたい。
- 水素吸蔵物質の実用化に向けた出口イメージとしては、大きく分けて二つあるように思われる。一つは固定した「水素ステーション」、もう一つは「自動車への搭載」と考えられる。それぞれは水素吸蔵に必要な圧力、吸蔵・放出の速度特性、さらには劣化特性など、おのずと異なってもよいと考えられる。プロジェクトの終盤に向けて、それぞれに的を絞った研究を行うことを意識していた方がよいように思う。
- 水素貯蔵材料の実用化に向けた耐久性への取り組みについては、これまでの成果が主として材料の内的要因による劣化機構の解明やその対応に偏っている印象があり、市販水素の純度がさほど高くないことも考慮に入れれば、水素ガス中の不純物による被毒などの外的要因による劣化機構の解明やその対策についても積極的に検討を行っていくことが望ましい。
- 産業界でこれらの材料の実用化を加速するためには、このプロジェクトで提案された種々の新規物質が実用材料として満たすべき性質や条件を明らかにし、開発方法の具体的な指針を示すことが必要であろう。
- 出口の構成要素の重みづけが産業界のニーズとマッチしていないおそれがある。開発指針が実験に落としこめる形で提示されるかどうか、そこに産業界の期待があると思われる。部分的にクローズドになるのもやむをえないと割り切り、現物の材料開発につなげていくべきである。計算科学か

ら開発指針が出るとすれば、何を計算するかという入り口がしっかりしている必要がある。そうでなければ、「絨毯爆撃」的に計算をやってみせるしか手が無い。前者の場合、何を計算するかという提案は機密に属するため、やすやすとは出てこない。そこの仕組みづくりが求められる。

〈その他の意見〉

- ・ 積層合金につなぎの役目を果たす層を導入すること、欠陥のまわりの構造を制御することなど、金属系で幾つかの開発指針が見出されている。実用化のためには軽元素の組み合わせの中から有望なものを提言していく必要があるので、金属と非金属の別を超えた具体的な開発指針を目指してほしい。
- ・ プロジェクトの実施を通して、水素貯蔵材料分野の人材育成が促進されることを期待している。
- ・ このプロジェクトで開発された NOVA 等の大型装置を含めた種々の装置や測定技術はかなり高度なものであり実際にこれらの導入や利用に際して高いハードルがあるので、これらのノウハウをいかに共有していくかが新規材料の実用化の鍵になるとと思われる。

2. 個別テーマに関する評価結果

2. 1 金属系水素貯蔵材料の基礎研究

成果、実用化の見通しに関する評価、および 今後に対する提言

金属系水素貯蔵材料の構造解析技術の高度化、特にその場観察 (*in-situ*) 法の確立に向けての努力を評価する。今後、3 装置を使って産業界と連携する計画も良い。また、水素吸蔵特性の理解と反応機構の解明に向けての実験結果も興味深く、今後の研究の進展が期待できる。特に、その場測定法による水素吸蔵状態および構造変化の解析を高度化したことは世界的にも注目される重要な成果であり、世界の他のグループの追随を許さない最先端の研究を行っている」と評価できる。一方では、個々の研究成果がいかによりよい水素貯蔵材料の開発へ結びついていくのかという点が見えてこない。水素貯蔵材料の構造解析によりそのバルクおよび局所構造を明らかにした後、どのように水素貯蔵量の飛躍的な拡大を実現するのか、そのプロセスがまだ明確ではない。「構造と水素貯蔵特性に関する仮説とその検証」は古くからの課題であり、今後どのような切り口からこれを扱おうとするのか、明確にした上で研究されることを望む。

〈肯定的意見〉

- 金属系水素貯蔵材料の構造解析技術の高度化、特にその場観察 (*in-situ*) 法の確立に向けての努力を評価する。今後、3 装置を使って産業界と連携する計画も良い。また、水素吸蔵特性の理解と反応機構の解明に向けての実験結果も興味深く、今後の研究の進展が期待できる。
- *in-situ* X 線・中性子回折を用いた結晶構造では、積層するセルの設計により新たな吸蔵特性を得られる可能性を見出し、陽電子消滅法では、La-Ni 系で欠陥の周囲の元素の同定を行う等世界初の高いレベルの成果が得られた。この高い解析技術及び解析結果は、吸蔵材開発において、重要な切り口を与えると評価できる。
- *in-situ* X 線回折により 2 種類の水素化物の構造、膨張の様子を観察出来た成果、陽電子消滅 CDB 法で LaNi 系材料において Ni サイトに空孔が導入されることが分かったという成果は高く評価出来る。
- 水素貯蔵材料のバルク構造・局所構造および格子欠陥に関するその場観察手法の確立は、水素貯蔵材料の内的な変化による耐久性の劣化のメカニズムの解明とその対策に関しての貢献が期待できるため、世界的にも注目される重要な成果であり、高く評価されるべきものと考ええる。
- *in-situ* 構造解析手法が順調に開発されている。中でも CDB 法の成果が顕著で、欠陥のエンジニアリングという分野が開拓された。構造解析が統合的に進んだため、金属および金属中の水素に対する微視的イメージが整

理されてきた。この分野の研究者に刺激を与え、従来にない合金を着想するヒントを開示しているため、この分野に革新を起こす可能性を秘めている。「基礎研究ただ乗り」から脱却する姿勢を示しており、日本のプレゼンスを高めている。

- 世界の他のグループの追随を許さない世界最先端の研究を行っている」と評価できる。特に、*in-situ* 化を目指した種々の装置による精密な研究は水素吸蔵合金の開発にはかかせない標準的な手法になるものと思われ、高く評価できる。
- その場測定法による水素吸蔵状態および構造変化の解析を高度化したことは高く評価でき、これらの手法の汎用性もある。また、基礎科学としての成果も上がっている。

〈問題点・改善すべき点〉

- 本グループは、「構造と水素貯蔵特性に関する仮説とその検証」を目指しているが、これ自身は古くからの課題であり、これまで金属系水素貯蔵材料では多くの研究がなされてきている。今後どのような切り口からこれを扱おうとするのか、明確にした上で研究されることを望みたい。既存の材料を研究しているのみでは、常識的な結果しか得られないことが多いので、狙いを定めて研究する必要があるかもしれない。
- これらの成果が実用化目標である水素貯蔵量5～6質量%達成に向けてどのように繋がっていくか、の道筋が見えない。
- 金属系水素貯蔵材料の重要な課題のひとつに水素貯蔵量の飛躍的な拡大が挙げられるが、水素貯蔵材料の構造解析によりそのバルクおよび局所構造を明らかにした後、どのように水素貯蔵量の飛躍的な拡大を実現するのか、そのプロセスが明確でないように思われる。
- 本プロジェクトの中間点としての現時点では、得られた詳細な研究成果からどのような物質開発を行っていけばよいかの具体的指針は明確ではないように思われる。今後、さらにこの点を強く意識した研究展開が望まれる。
- 水素吸蔵量、水素化物の安定性、繰り返し耐久性および反応速度の4者を重要課題として並列する方針には賛同できない。実用的な「P-T ウィンドウ」を設定した枠内で水素吸蔵量をここまで増やす、というアプローチでなければ、成果として出てくる開発指針を産業界が受け入れる可能性は低い。特許出願を目指すべきである。「H-H 距離を○○nm 以下にするための合金構造」、「○○と△△を積層してなる合金」などが例示される。
- 研究成果そのものは世界トップレベルであることは間違いないが、それら

がいかによりよい水素貯蔵材料と結びついていくのかという点が見えてこない。他のグループや本事業以外の研究者などの意見やアイデアを積極的にとりいれていくことが、新材料開発への近道になるものと思われる。

〈その他の意見〉

- 金属系水素貯蔵材料の分野には、他の NEDO 事業のみならず、我が国にはたくさんの研究者がいる。金属系水素貯蔵材料の開発指針を得るために、それらの研究者を含めて議論することが必要であろう。
- 積層合金においてつなぎの役目を果たす層が存在することを見出したのは特筆されるが、これを「後知恵」に終わらせず、どのような層構成ならどのような層がつなぎの役目を果たすか、軽元素の組み合わせの中から有望なものを提言し、金属系の開発指針を具体的に示すことを目指してほしい。現状の開発指針はシーズとよべる形にはなっていない。本研究の成果が活用されるにしても、その活用者は成果を明示的に活用したとは考えず、自ら着想したと思う可能性が高い。「後知恵」から予言に転じ、具体的な組成物でシーズを示すことができれば、**Departure from Basic** が達成できる。

2. 2 非金属系水素貯蔵材料の基礎研究

成果、実用化の見通しに関する評価、および 今後に対する提言

ナノ複合水素貯蔵材料という概念で Mg 系新材料を開発し、室温水素吸蔵量 5 w t % を実現した材料における反応速度解析から律速段階を明らかにした成果、また同じく室温水素放出量 5 w t % を実現した LiH-NH₃ システムを作製し、分子動力学シミュレーションで活性表面を解明した成果などは、高く評価される。複合水素化物に関する成果では、混合ガスの分圧制御による熱力学的な平衡温度の制御の可能性など、独創性の高いアプローチが含まれている。その場観察手法の開発などでも、今後の水素貯蔵・放出の動的特性の測定に貢献し得る、注目すべき成果を挙げている。軽元素系水素化物を触媒とナノレベルで複合化することにより、新規な水素貯蔵材料を得ようという着想は非常に優れている。しかしながら、個々の新規物質に関する成果は世界の研究をリードする優れた研究であるが、これらが実用材料になりうるかどうかを判断するのは難しい。また、研究実施者間の連携が不足しているように思えるので、研究協力体制を立て直してほしい。非金属系水素貯蔵材料の分野には、他の NEDO 事業のみならず我が国には多くの研究者がいるので、最終目標である開発指針を得るためには、適宜、それらの研究者を含めて議論することが必要であろう。

〈肯定的意見〉

- アンモニアの水素を LiH の共存下で取り出す発想は斬新であり、扱いの困難な系を高度にその場観察できるようにした技術進歩は評価できる。薄膜、単結晶等が今後に予定されている。発散しすぎることを怖れるが、将来に数多くの芽を残していくことが期待され、非金属系水素貯蔵材料のセンターとして人材教育・育成の実を挙げる可能性が高い。
- 軽元素系水素化物を触媒とナノレベルで複合化することにより、新規な水素貯蔵材料を得ようという着想は非常に優れている。また、試料搬送ツールの開発によりボールミル法で作製した試料表面の汚染防止をした上で種々の評価装置で解析できるようになったことは、大いに評価できる。
- 非金属系水素貯蔵材料の研究はたいへん重要であり、長年培われたその場観察・分析技術を駆使して、成果を上げられることを期待している。
- ナノ複合水素貯蔵材料という概念で Mg 系新材料を開発し、5 w t % を実現した材料における反応速度解析から律速段階を明らかにした成果、また同じく 5 w t % を実現した LiH-NH₃ システムを作製し、分子動力学シミュレーションで活性表面を解明した成果などは、高く評価される。
- その場観察による分析と第一原理計算の協調により、非金属系水素貯蔵材料の研究が効率よく推進されていると評価できる。

- 複合水素化物に関する成果では、混合ガスの分圧制御による熱力学的な平衡温度の制御の可能性など、独創性の高いアプローチが含まれており、また、その場観察手法の開発などでも、今後の水素貯蔵・放出の動的特性の測定に貢献し得る、注目すべき成果を挙げている。
- ナノ複合系水素貯蔵材料はバルク材料とは異なる機能を持たせることが可能であり、これら物質のその場観察を含めた研究は、将来の実用化に向けても重要であると考えられる。

〈問題点・改善すべき点〉

- ナノ複合系材料の場合、その表面と水素の相互作用や、表面機能の解明が重要と考えられるため、この点により力を入れる必要もあると思われる。
- 第一原理計算は発展途上であり、ナノ構造材料の作製および解析と同レベルには至っていないように見える。視覚に訴えるプレゼンツールとして位置づけるのか、あくまでも開発指針を与えるレベルをめざすのか、決め時である。電解チャージの位置づけが不明確。発想の源が他の分野にあることには何ら問題無いが、超高圧と肩を並べ、さらにはこれを追い越すような究極の水素チャージ法として位置づけるべきではないか。
- 個々の新規物質に関する成果は世界の研究をリードする優れた研究であるが、これらの実用材料になりうるかという点に関して判断するのが難しい。実用材料として不足している点は何なのかということをはっきりするとともにそれを解決する指針を示すことが必要である。
- 環境セルを用いた透過型電子顕微鏡観察は、すでにこれまで国内外で行われてきた技術であり、これを用いて何を調べようとするのかを明確にした上で、研究に取り組んでほしい。このことは、シミュレーションや電解チャージの研究についても同様である。また、これらの研究実施者間の連携が不足しているように思えるので、研究協力体制を立て直してほしい。
- 非金属系水素貯蔵材料においては、反応速度の改善が重要な開発課題である。今後、その指針の確立に向けての研究を加速していただきたい。また、これまでの研究成果は、水素ガス中の不純物などの外的要因による水素貯蔵材料の耐久性への影響への貢献が期待できると考えられ、その方面への研究の展開も検討していただきたい。

〈その他の意見〉

- ・ 非金属系水素貯蔵材料の分野には、他の NEDO 事業のみならず我が国には多くの研究者がいるので、最終目標である開発指針を得るためには、適宜、それらの研究者を含めて議論することが必要であろう。

- MgH_2 をナノ複合化して室温で水素吸蔵できるようにした点は評価できるが、 MgH_2 は水素エネルギーシステムの中で枢要な地位を占めるとは考えられない。水素放出温度を 100°C 付近に下げることが原理的に不可能だと考えられるが、これを原理ごと打破して実用に持ち込めるのかどうか。これを真剣に考えてほしい。アンモニアパイプラインと複合化させるとアンモニア-LiH 系は輸送面で革新を起こす可能性がある。活性化 LiH の解析により、これを **well-defined** なものとしてほしい。

2. 3 水素と材料の相互作用の実験的解明

成果、実用化の見通しに関する評価、および 今後に対する提言

このグループの研究は必須であり、水素貯蔵材料の物性を明らかにして、その開発指針を導出されることを期待している。高圧下における水素化反応を直接観察できる高圧 X 線回折システムを開発して、直接反応による AlH_3 合成を実現した成果が特に高く評価出来る。合成したその場で解析可能であるため、今後多くの供試材を評価する中から、有望な材料を見つける可能性を秘めている。また、 AlH_3 結晶成長過程のその場観察での自己微細化は、今後の吸蔵メカニズム解明にとって興味深い。 AlH_3 系の材料がより低温・低圧力で可逆的に水素を吸放出できるようにするのが課題であると考えられるが、今のところ具体的な問題解決の道筋が示されていない。この材料の水素吸蔵材料としてのポテンシャルを明らかにしてほしい。

一方では、参画している委託先が多すぎて、全体としてのまとまりがない。研究課題についても、希土類金属および遷移金属の水素化物の現在の成果を見る限り、実験結果の背後にある新しい物理が見えてこない。高性能水素貯蔵材料の開発に向けて、どのような物性指針を得ようとするのか、グループ内で十分議論をして、研究を進めてほしい。

〈肯定的意見〉

- 高圧下における水素化反応を直接観察できる高圧 X 線回折システムを開発して、直接反応による AlH_3 合成を実現した成果が特に高く評価出来る。
- Al と水素の直接反応に世界で初めて成功し、*in-situ* X 回折観察を行い今後の開発への指針を得られた。 AlH_3 結晶成長過程のその場観察での自己微細化は、今後の吸蔵メカニズム解明にとって興味深い。今後、製造時の低圧化や低温化、水素放出時の加熱温度の低下へ結びつけることで、車載への可能性も見えてくると評価できる。
- 高温・高圧の条件下におけるその場観察手法の確立、実用材料であるアルミニウムの水素化・脱水素化のサイクルに成功した等の研究成果は、世界的にも非常に注目度が高いと考えられる。
- このグループの研究は必須であり、水素貯蔵材料の物性を明らかにして、その開発指針を導出されることを期待している。これまでの研究の中では、アルミニウム水素化物 (AlH_3) の研究が面白い。高圧の状態図を作ったことは評価できる。
- Al-H 系の水素化・脱水素化サイクルの研究などの基礎研究は高く評価できる。
- 超高水素圧力で元素間の直接反応による AlH_3 合成を達成した点は評価で

きる。合成したその場で解析可能であるため、今後多くの供試材を評価する中から、有望な材料を見つける可能性を秘めている。水素化反応の前駆現象として結晶の微細化がおこることを見出したのは意義深い。アルミ自身の粒界制御や合金化などの旧来技術を導入するだけで、水素化反応の劇的な促進や脱水素化反応の制御などが可能となる期待がある。

- AlH_3 は従来からよく知られた高い吸蔵量をもった材料であるが、これを水素ガスとの直接反応により製造できたということは、非常に画期的であり今後の水素吸蔵材料の新たな可能性を示せた点で高く評価できる。

〈問題点・改善すべき点〉

- 他の方法で合成された AlH_3 では多形が知られている。超高水素圧力で合成したものはそのどれに該当するのか、どれにも該当しないのか、明示すべきである。 AlH_6 八面体が頂点共有しているとする図が示されているが、実験結果なのか概念図なのか明確ではない。もし実験結果であるとするならば、超高水素圧力で合成される AlH_3 には水素化・脱水素化のサイクルが期待できないということにならないか。これを「未実現」ととらえるべきではない。もし「未実現」と言うなら、頂点共有の八面体が水素を可逆的に放出・吸蔵する事例を先に示すべきだと考える。事例が見つからない場合は、八面体が頂点共有する結晶形ではなく、稜共有から面共有へと進んだ結晶形を得るための実験を優先すべきではないか。
- AlH_3 系の材料が可逆的に水素を吸放出できるようにするのが、このグループの最大の課題であると考えられる。しかし、今のところこれに関して具体的な問題解決の道筋が示されていないように思われる。表面改質、合金化等の適当な手段を探るとともに計算グループ等との連携を強化してこの材料の水素吸蔵材料としてのポテンシャルを確立していただきたい。
- 参画しているグループが多すぎて、全体としてのまとまりがないように思える。研究課題についても、希土類金属および遷移金属の水素化物の現在の成果を見る限り、実験結果の背後にある新しい物理が見えてこない。例えば、s-d相互作用は昔から言われてきていることであり、それのみでは物足りない。高性能水素貯蔵材料の開発に向けて、どのような物性指針を得ようとするのか、グループ内で十分議論をして、研究を進めてもらいたい。
- この成果が実用化目標である水素貯蔵量5～6質量%達成に向けてどのように繋がっていくか、の道筋が見えない。
- これまでの研究成果や超高压を用いたアプローチが水素吸蔵量、水素化物安定性、反応速度、耐久性、といった水素貯蔵材料に要求される様々な特

性に対してどのように貢献するのか、コンセプトとしては理解できるが、具体的なプロセスについては分かりくさを感じる。また、一部の研究課題についてはもう少し研究を加速させ、得られた知見が、金属系、非金属系水素貯蔵材料等の他の研究グループに活かされるようになることが望ましい。

- 「金属系水素貯蔵材料」と「非金属系水素貯蔵材料」の水素吸蔵・放出メカニズムが本質的に違うのであれば、その違いの利点は何であるのかを明確に意識して、それを利用して、より実用的な利用（コストも含めて）が可能であるような材料開発の指針構築を目指してほしい。

〈その他の意見〉

- ・ 最近では EV 用バッテリーシステムの交換システムの開発も進んでいる。 AlH_3 はオフボード再生の車載水素貯蔵材料の有力候補だが、カートリッジ式の吸蔵タンクの可能性も十分考えられ、開発に期待したい。
- ・ アルミニウムを中心に水素貯蔵材料を開発し、燃料電池自動車に搭載しようとするならば、オフボードで水素充填することが前提となり、水素放出温度、水素放出速度等を材料の表面状態の制御で実用条件に合わせる必要がある。「水素と材料の相互作用」というときの「材料」には表面の観点を強く盛り込むべきである。 Fe-H 系の磁性転移も興味深いだが、これを実用化とどう関連づけるのか、考えを示してほしい。センサーへの応用が語れるとしても、水素貯蔵の現場で使えるものでなければ、波及効果の項目を一つ増やしただけに終わってしまう。

2. 4 計算科学による水素貯蔵材料の基盤研究

成果、実用化の見通しに関する評価、および 今後に対する提言

計算科学は他の4テーマの研究の基盤であり、他テーマの研究成果をフィードバックすることで、更に計算科学の精度向上が期待でき、水素貯蔵材料のメカニズムの解明と開発指針を得るうえで重要な研究である。それだけに、3つの委託先が別々ではなく、協力・連携して成果を出されることを切に期待している。これまでの検討による構造安定性や水素貯蔵メカニズムなどに関する知見は、水素貯蔵材料の研究開発に貢献できる可能性が高いと考えられる。しかしながら、これまでの成果は、水素貯蔵材料の開発指針を得るという視点からすれば、どれも不十分である。既存の材料の計算をしたからと言って、新規材料を探索したことにはならない。現時点では、実験グループとの連携あるいは、実験グループへのフィードバックがまだ十分とは言えないように思われる。グループ内および他の実験グループとの緊密な連携のもとに計算を行い、計算結果の背後にある物理を考えて最終目標を達成してほしい。水素貯蔵材料の耐久性に関する重要課題である水素ガス中の不純物による被毒の影響についての検討も必要である。また、「水素貯蔵シミュレーター」を最終成果とするのではなくプロトタイプを速やかに公開し、ユーザーが持ち込んだ材料提案を計算科学で評価できる体制を築くべきである。

〈肯定的意見〉

- 新規な水素吸蔵用材料の提案がなされているのはまさに計算機実験の独壇場であり、今後、実験グループにおける開発目標材料の選択のための良い指針となると期待される。
- リチウム添加MOFにおける水素貯蔵特性の向上を吸着エネルギー変化から解明したこと、HIAにおける電子半径比による非晶質化の解明、など高く評価される成果が出ている。これらの結果から実用材料の提案が出てくる可能性が示唆されており、計算科学をプロジェクトに取り込んだ意義が十分に出ている。
- 計算科学は他の4テーマの研究の基盤であり、他テーマの研究成果をフィードバックすることで、更に計算科学の精度向上が期待できる。水素吸蔵材のメカニズム解明に必須であり、汎用性のあるソフトウェアが期待できる。
- 様々な新規水素貯蔵材料に関するシミュレーション探索や構造安定性、水素貯蔵メカニズムなど、幅広い材料や特性に関して最先端の研究成果を挙げており、構造安定性や水素貯蔵メカニズムなどに関する知見は、水素貯蔵材料の研究開発に貢献できる可能性が高いと考えられる。

- それぞれ個別の研究成果は高く評価できると考えられる。実験結果だけではわかり難い情報を与えてくれるという意味で、今後本プロジェクトに貢献するところが多く出てくることを期待する。
- 斯界で世界の先端を走る研究者が集結し、学会で認められる成果が出始めている。計算科学がどれだけ有用なのか、産業に対して何らかの提言ができるのか、良くも悪くも結論が出るところまで来たことは評価できる。
- 計算科学による研究は、水素貯蔵材料の開発指針を得るうえで重要な研究である。それだけに、3つの委託先が別々ではなく、協力・連携して成果を出されることを切に期待している。

〈問題点・改善すべき点〉

- 現時点では、実験グループとの連携あるいは、実験グループへのフィードバックがまだ十分とは言い難いように思われる。この点を工夫して進めていくべきと思う。
- これまでの成果は必ずしも満足のいくものではない。それらは、研究自体には意味があるのかもしれないが、水素貯蔵材料の開発指針を得るという視点からすれば、どれも不十分である。既存の材料の計算をしたからと言って、新規材料を探索したことにはならない。グループ内および他の実験グループとの緊密な連携のもとに計算を行い、計算結果の背後にある物理を考えて最終目標を達成してもらいたい。
- 分子動力学シミュレーションで水素貯蔵メカニズムに肉薄する成果を是非出してほしい。
- クラスハイドレートやMOFなどのシミュレーション探索研究成果を実験的に実証するための方法やその組織については不明瞭な部分があり、検討をお願いしたい。また、水素貯蔵材料の耐久性に関する重要課題である水素ガス中の不純物による被毒の影響についての検討も必要であると思われる。非金属系水素貯蔵材料のグループとの連携の相手はその中の計算系メンバーが主たるもののように記されているが、実験系メンバーとの連携も強化すべきでは？
- クラスレートハイドレート，MOFなどに関する先行の実験データをまず計算科学的に説明して，第一原理計算が実際の材料設計に役立つことをまず示してほしい。先行データがもし怪しいとするならば， AB_5 合金， AB_2 合金，BCC合金等で蓄積されてきた水素吸蔵量を第一原理で説明することを望む。PCT曲線の推算はその次の課題である。PCT曲線をパラメータでフィッティングする研究には先行事例が多いが，類似のパラメータを第一原理で求めても，その瞬間に結果が経験的なものとなるため，第一級

の成果とはなりえないと考える。学会で受け入れられていると思えるが、産業界にどうやって受け入れられるのか。「水素貯蔵シミュレーター」を最終成果とするのではなくプロトタイプを速やかに公開し、ユーザーが持ち込んだ材料提案を計算科学で評価できる体制を築くべきである。

- まったくの新規材料についての水素吸蔵性を計算しそれを提案することももちろん大切であるが、計算グループの一方的提案だけで終わってしまう可能性がある。実験グループでの検証が可能であるような材料系を選択して、相互により影響を及ぼしつつ研究を進めることも今後必要であろう。

〈その他の意見〉

- ・ 水素原子間の距離はどこまで縮められるかという問いのほかに、水素分子の臨界温度は系が小さくなり境界のポテンシャルが強くなるとどこまで上げられるかという **open question** がある。また、水素分子の凝縮体の密度がどこまで高められるかという **open question** も存在する。クラスレートハイドレートの中の凝縮という具体的事例から出発するのは構わないが、これらの **open question** に答える気で理論を深めてほしい。
- ・ (水素吸蔵過程のダイナミクスの解析について) 水素吸蔵合金中の水素拡散経路を計算し、水素移動のメカニズムを解析しようという試みは大変意欲的であり評価に値する。しかし、水素移動のダイナミクスには量子力学的な側面が大きく絡んでおり、今後この点を明らかにするような計算手法の開発を期待したい。

(PCT 曲線の推算について)

PCT 曲線を計算により求める試みがなされているが、 γ をフィッティングパラメータとすることにより実験の PCT が再現されている。しかし、新しい材料の PCT を予測するには、 γ パラメータを理論的に予測する必要があり、現段階では不十分である。この γ パラメータは水素原子同士の弾性的相互作用と考えられておりこれがまさに低濃度水素化物相と高濃度水素化物相が共存する (プラトーが出現する) 原因であるので、これを正しく評価することが計算機実験の中心になると思われる。今後の発展に期待したい。

- ・ 現在の研究では、平均 1.5 億円/年の研究費 (3 年間 4.6 億円) は、多すぎる。

2. 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成果、実用化の見通しに関する評価、および 今後に対する提言

世界トップレベルの性能を有する中性子実験装置の建設は、日本の水素貯蔵材料の研究開発だけでなく、世界の水素貯蔵材料の研究に寄与するところ大であり、更なる整備の加速が望まれる。中性子グループの研究は、これまでは専ら実験装置の開発と設置が中心であったが、予備測定結果を見る限り、今後の素晴らしい展開が期待できるものであり、大変評価できる。他のグループと連携を強め、新しい構造解析を行い、この分野を活性化することに貢献されることを期待している。本技術は、吸蔵材開発だけでなく、水素脆化のメカニズム解明等幅広い応用分野が考えられる。この装置で得られたデータを広く公表することにより、この装置の大いなる可能性を世の中にアピールしていくことが望まれ、ひいてはそれが新材料開発の加速につながると期待される。このグループの研究は、この事業のもっとも重要な中核の研究となることが期待される。装置のメンテナンス費用もかかるため、このグループの研究予算の充分なる確保が必要である。

〈肯定的意見〉

- ハードウェア建設が順調に進み、ダイヤモンド、シリカガラス等で所期のデータが得られるようになった。今後、水素化物の耐久性や H-H 距離の実測などに威力を発揮すると期待される。実用が先行している AB₅ 系の耐久性評価などで産業界と若手 PD の共同研究が進めば、実用と人材育成の両方が加速されよう。
- NOVA は水素吸蔵材料の開発における革新的で強力な装置であり、この装置の完成によりこの分野の研究に大きなインパクトを与える。これにより、新材料開発の加速、材料研究の高精度化が実現できるものと期待される。
- 中性子グループの研究は、これまでは専ら実験装置の開発と設置が中心であったが、予備測定結果を見る限り、今後の素晴らしい展開が期待できるものであり、大変評価できる。世界に冠たる装置を完成され、水素材料分野の研究に積極的に生かしていただきたい。他のグループと連携を強め、新しい構造解析を行い、この分野を活性化することに貢献されることを期待している。
- J-PARC における中性子全散乱装置 NOVA の開発が順調に進んでおり、今後の成果が大いに期待できる。
- 結晶・アモルファス・液体等の構造を解析できる装置として、吸蔵材開発のキーとなる基盤技術と理解できた。世界最高レベルの解析技術の構築と、その成果としての吸蔵材開発へのフィードバックを期待する。

- 世界トップレベルの性能を有する中性子実験装置の建設は、日本の水素貯蔵材料の研究開発だけでなく、世界の水素貯蔵材料の研究に寄与するところ大であり、更なる整備の加速が望まれる。
- 「中性子全散乱装置 NOVA」は水素吸蔵材料研究のために良く設計された装置であると考えられる。さまざまな水素吸蔵物質中における、水素の空間相関とその階層構造を解明する強力な実験手段になることが大いに期待される。この秋からは、加速器による中性子強度も上がる予定であるし、NOVA 内の検出器もある程度設置される予定であるのでこの装置の威力が期待される。

〈問題点・改善すべき点〉

- 実用が先行している AB₅ 系を評価する際には電気化学セルが必要になる。固気反応の *in-situ* 解析に偏することなく、産業界の具体的なニーズを拾ってほしい。
- 放射光、中性子、計算機が一体となって最も重要なターゲットに絞って 3 者のシナジー効果が世界的な成果をねらってほしい。中性子散乱は汎用性があるものだが、本プロジェクトではこれを多くの水素貯蔵材料のルーチンの分析（成果の数を稼ぐ方式）に終わらせるのではなく、一発でかいホームランをねらって進めるべきだと考える。

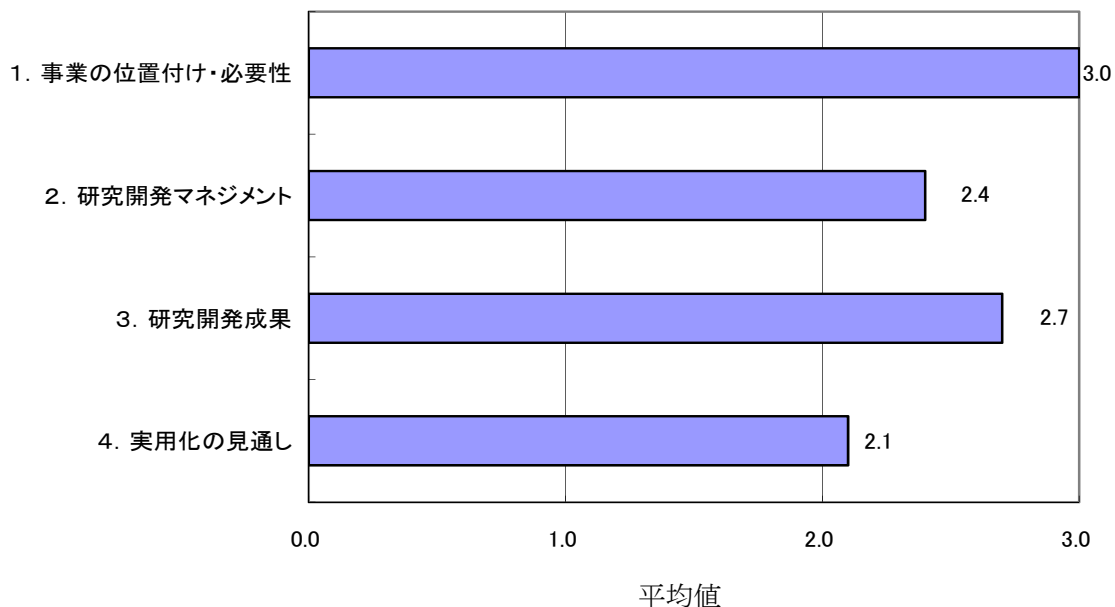
〈その他の意見〉

- ・ このグループの研究は、この事業のもっとも重要な中核の研究となることが期待される。装置のメンテナンス費用もかかる。このグループの研究に予算の充分なる確保が必要である。
- ・ 上記電気化学セルと関連して、電解チャージの *in-situ* 解析も行うべきである。アルミニウムを超高压水素化するのと電解チャージするのとで水素の入り方は同じなのか異なるのか。同じなら電解チャージは超高压の代用手段となり、異なれば合金開発の指針に影響を与える。
- ・ 現在装置の開発途中であるので、できるだけ早く当初の目標性能を出すことを望む。また、この装置で得られたデータを広く公表することにより、この装置の大いなる可能性を世の中にアピールしていくことが望まれ、ひいてはそれが新材料開発の加速につながると期待される。
- ・ 本技術は、吸蔵材開発だけでなく、水素脆化のメカニズム解明等幅広い応用分野が考えられる。
- ・ 「中性子全散乱装置 NOVA」が威力を発揮するためには、加速器の安定運転と中性子強度の増大が必要であるが、これは本プロジェクトとは別の問

題であり、加速器の運転状況に合わせた効率的使用が重要と思われる。また、ロスアラモスの装置の効率的利用が望まれる。

3. 評点結果

3. 1 プロジェクト全体



評価項目	平均値	素点 (注)							
		A	A	A	A	A	A	A	A
1. 事業の位置付け・必要性について	3.0	A	A	A	A	A	A	A	A
2. 研究開発マネジメントについて	2.4	B	A	A	A	B	B	B	B
3. 研究開発成果について	2.7	B	A	A	A	A	A	A	B
4. 実用化の見通しについて	2.1	B	A	B	B	B	B	B	B

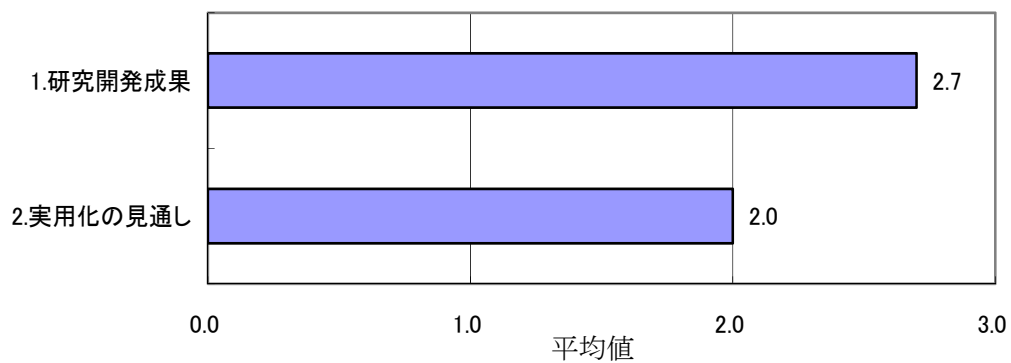
(注) A=3, B=2, C=1, D=0 として事務局が数値に換算し、平均値を算出。

〈判定基準〉

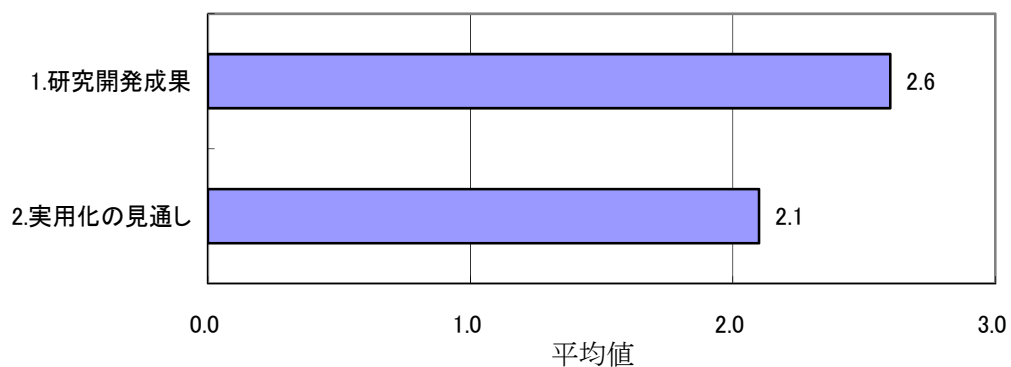
1. 事業の位置付け・必要性について	3. 研究開発成果について
・非常に重要 →A	・非常によい →A
・重要 →B	・よい →B
・概ね妥当 →C	・概ね妥当 →C
・妥当性がない、又は失われた →D	・妥当とはいえない →D
2. 研究開発マネジメントについて	4. 実用化の見通しについて
・非常によい →A	・明確 →A
・よい →B	・妥当 →B
・概ね適切 →C	・概ね妥当であるが、課題あり →C
・適切とはいえない →D	・見通しが不明 →D

3. 2 個別テーマ

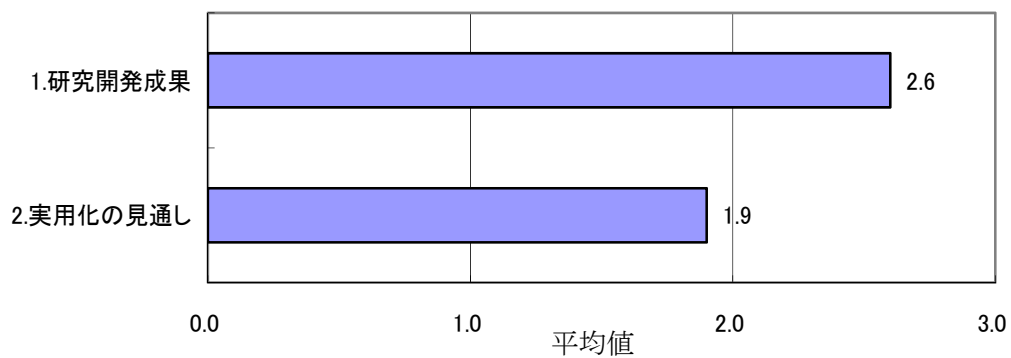
3. 2. 1 金属系水素貯蔵材料の基礎研究



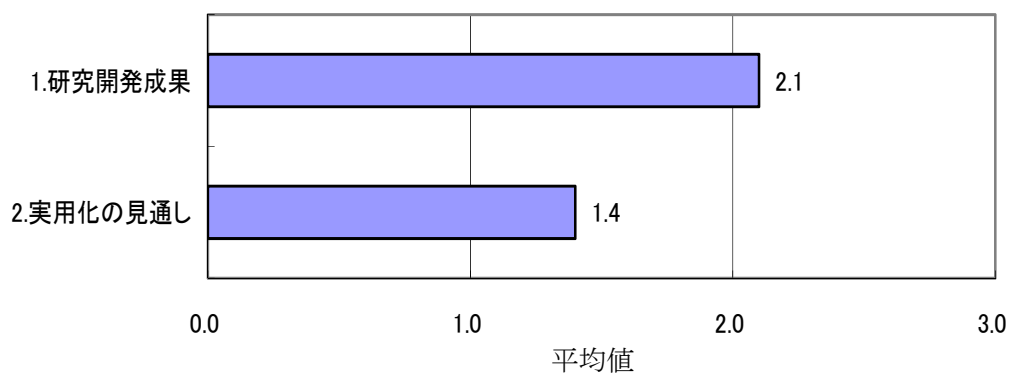
3. 2. 2 非金属系水素貯蔵材料の基礎研究



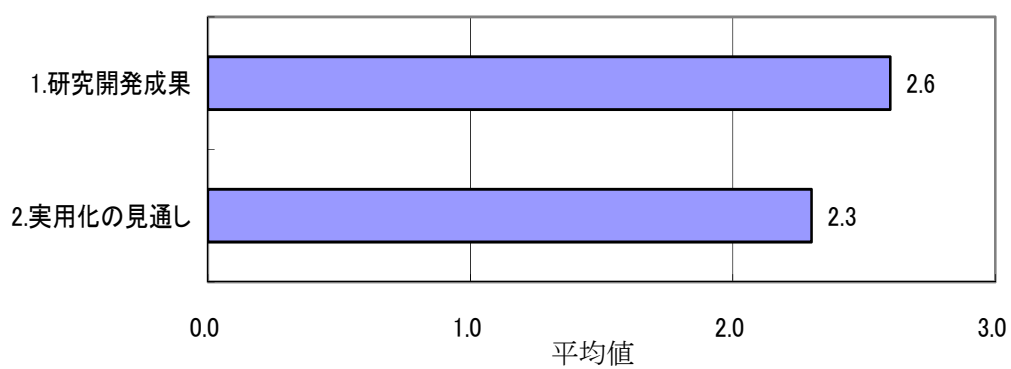
3. 2. 3 水素と材料の相互作用の実験的解明



3. 2. 4 計算科学による水素貯蔵材料の基盤研究



3. 2. 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



個別テーマ名と評価項目	平均値	素点 (注)							
3. 2. 1 金属系水素貯蔵材料の基礎研究									
1. 研究開発成果について	2.7	B	A	A	B	A	A	A	A
2. 実用化の見通しについて	2.0	B	A	B	B	B	C	B	B
3. 2. 2 非金属系水素貯蔵材料の基礎研究									
1. 研究開発成果	2.6	B	B	A	A	A	A	B	B
2. 実用化の見通し	2.1	B	B	B	A	B	B	B	B
3. 2. 3 水素と材料の相互作用の実験的解明									
1. 研究開発成果	2.6	A	A	B	A	A	B	B	B
2. 実用化の見通し	1.9	B	A	C	A	B	C	C	C
3. 2. 4 計算科学による水素貯蔵材料の基盤研究									
1. 研究開発成果	2.1	C	B	B	A	B	A	B	B
2. 実用化の見通し	1.4	B	B	C	A	D	C	C	C
3. 2. 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									
1. 研究開発成果	2.6	B	A	A	B	A	B	A	A
2. 実用化の見通し	2.3	A	A	B	B	C	B	A	A

(注) A=3, B=2, C=1, D=0 として事務局が数値に換算し、平均値を算出。

〈判定基準〉

1. 研究開発成果について	2. 実用化の見通しについて
・非常によい	→A ・明確 →A
・よい	→B ・妥当 →B
・概ね適切	→C ・概ね妥当であるが、課題あり →C
・適切とはいえない	→D ・見通しが不明 →D

第2章 評価対象プロジェクト

1. 事業原簿

次ページより、当該事業の事業原簿を示す。

「水素貯蔵材料先端基盤研究事業」

事業原簿(公開)

担当部	独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 燃料電池・水素技術開発部
-----	---

— 目 次 —

概 要

プロジェクト用語集

I. 事業の位置付け・必要性について

1. NEDOの関与の必要性・制度への適合性.....	I-(1)
1.1 NEDOが関与することの意義.....	I-(1)
【政策上の位置付け】.....	I-(1)
【研究開発政策上の位置付け】.....	I-(1)
【NEDO 事業としての妥当性】.....	I-(2)
【本事業開始に向けた NEDO の準備】.....	I-(3)
【NEDO 関与の意義】.....	I-(3)
1.2 実施の効果(費用対効果).....	I-(3)
2. 事業の背景・目的・位置づけ.....	I-(4)
2.1 事業の背景.....	I-(4)
2.2 事業の目的.....	I-(5)
2.3 事業の位置づけ.....	I-(6)

II. 研究開発マネジメントについて

1. 事業の目標.....	II-(1)
【事業全体の研究開発目標】.....	II-(1)
【研究開発項目毎の研究開発の目標】.....	II-(1)
2. 事業の計画内容.....	II-(3)
2.1 研究開発の内容.....	II-(3)
【研究開発の実施期間】.....	II-(3)
【研究開発予算】.....	II-(3)
【研究開発全体の計画内容】.....	II-(3)
【研究開発項目毎の計画内容】.....	II-(7)
2.2 研究開発の実施体制.....	II-(27)
2.3 研究の運営管理.....	II-(31)
3. 情勢変化への対応.....	II-(35)
【体制】.....	II-(35)
【加速財源】.....	II-(35)
4. 評価に関する事項.....	II-(35)

III. 研究開発成果について

1. 特許、成果の普及等.....	III1-(1)
-------------------	----------

IV. 実用化の見通しについて.....

1. 成果の実用化について.....	IV-(1)
2. 波及効果.....	IV-(14)

(添付資料)

- ・プログラム基本計画 : エネルギーイノベーションプログラム基本計画
- ・プロジェクト基本計画 : 水素貯蔵材料先端基盤研究事業基本計画
- ・技術戦略マップ(分野別技術ロードマップ)
- ・事前評価関連資料(事前評価書、パブリックコメント募集の結果)
- ・特許論文リスト

概要

最終更新日 平成21年7月17日

プログラム (又は施策)名	エネルギーイノベーションプログラム							
プロジェクト名	水素貯蔵材料先端基盤研究事業	プロジェクト番号			P07002			
担当推進部/担当者	燃料電池・水素技術開発部 担当者氏名：青塚聡、山本祐義（H21年6月現在） 燃料電池・水素技術開発部 担当者氏名：青塚聡、山本祐義（H20年4月～） 燃料電池・水素技術開発部 担当者氏名：玉生良孝、青塚聡（H20年1月～H20年3月） 燃料電池・水素技術開発部 担当者氏名：玉生良孝、山下隆志（H19年6月～H19年12月）							
0. 事業の概要	燃料電池自動車の実用化に向けて重要となる水素貯蔵材料の開発のために、各種実験的検証と計算科学的検証を多角的・融合的に実施することにより、水素貯蔵の基本原理の解明、さらには水素貯蔵能力の革新的向上に必要な条件を明らかにして、開発指針を産業界へ提供することを目指す。							
I. 事業の位置付け・必要性について	本事業は、新エネルギー技術の開発等によってエネルギー供給の安定化・効率化、地球温暖化問題（CO ₂ ）等地球環境問題の解決、新規産業・雇用の創出、水素エネルギー社会の実現等を図ることを目的とする「エネルギーイノベーションプログラム」の一環として実施する。 現在、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・貯蔵するための技術として「水素貯蔵材料（水素を吸蔵することが可能な合金等）」が注目を浴びているが、実用化・普及のためには水素吸蔵能力の大幅な性能向上が必要とされている。 このような情勢を踏まえ、本事業では各種実験的検証と計算科学的検証を多角的・融合的に実施することにより、水素貯蔵の基本原理の解明、さらには水素貯蔵能力の革新的向上に必要な条件を明らかにして、開発指針を産業界へ提供することを目指す。 そして、本事業により得られた成果を水素貯蔵材料の開発指針として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及び将来の燃料電池自動車の実用化・普及を図ることが期待できることから、本事業の必要性は高い。							
II. 研究開発マネジメントについて								
事業の目標	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。							
事業の計画内容	主な実施事項	H19fy	H20fy	H21fy	H22fy	H23fy		
	金属系材料の基礎研究	結晶構造等解析手法開発			▽金属系評価手法確立			
						材料評価による指針▽		
	非金属材料の基礎研究	ナノ構造材料解析手法開発			▽非金属系評価手法確立			
						材料評価による指針▽		
	水素と金属の相互作用の研究	装置導入・手法開発			▽SP8活用評価手法確立			
		典型金属・合金水素化物評価				水素貯蔵材料評価 高濃度化水素化物指針▽		
計算科学研究	計算手法開発・動力学解明				計算科学的手法確立▽			
中性子基盤研究	中性子散乱装置の開発・製作			▽中性子散乱装置の立上げ				
					中性子散乱法確立▽			
成果のまとめ				▽中間評価				
開発予算 (単位：百万円)	会計・勘定	H19fy	H20fy	H21fy	H22fy	H23fy	総額	
	一般会計	0	0	0				
	特別会計（需給）	757	908	1,000			2,664	
	加速予算	0	210	269			479	
	総予算額	757	1,118	1,269			3,144	

開発体制	経産省担当原課	資源エネルギー庁 省エネルギー・新エネルギー部 新エネルギー対策課・燃料電池推進室	
	プロジェクト リーダー	秋葉悦男 (独立行政法人産業技術総合研究所 エネルギー技術研究部門 副研究部門長)	
	委託先	(独)産業技術総合研究所エネルギー技術研究部門－(再委託先：米国ロスアラモス国立研究所)、広島大学先進機能物質研究センター、北海道大学、上智大学、(独)日本原子力研究開発機構、兵庫県立大学、神戸大学、大阪大学、岐阜大学、広島大学理学研究科、(財)高輝度光科学研究センター、東北大学大学院工学研究科、産業技術総合研究所計算科学研究部門、(独)物質・材料研究機構、東北大学金属材料研究所、高エネルギー加速器研究機構－(再委託先：(独)日本原子力研究開発機構、京都大学、山形大学、福岡大学、九州大学、新潟大学)	
情勢変化への対応	平成21年7月に、高エネルギー加速器研究機構(中性子グループ)の共同実施先として、ロスアラモス国立研究所を追加。これは、両者が既に包括的に結んでいる覚書(MOU)に基づくものであり、それぞれのノウハウや研究手法の有効活用を通して、中性子散乱法による水素貯蔵材料の構造・状態解析を高度化することが目的。		
評価に関する事項	事前評価	18年度実施	担当部 燃料電池・水素技術開発部
	中間評価	21年度実施	担当部 研究評価・広報部
Ⅲ. 研究開発成果について	<p>【事業全体の研究開発目標と成果】中間目標は、「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」ことであり、以下のとおり達成した。</p> <p>事業成果として、まず、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した。そして、それらの研究基盤を活用して、世界初の Al 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している。</p> <p>【個別テーマ毎の研究開発目標と成果】</p> <p>金属系材料グループでは、金属系水素貯蔵材料の構造解析に必要な実験・解析技術の高度化を進めている。中でも、水素圧力下における In-situ PCT-X 線回折同時測定装置、In-situ 陽電子消滅法等は世界で初めて構築された研究設備であり、その活用を通して反応特性の理解および機構解明への手がかりをつかむところまで来ている。</p> <p>非金属系材料グループでは、主に、Mg 系ナノ複合水素貯蔵材料等について、その場分析法の構築と活用を通して、軽元素と触媒のナノ複合化による「可逆性吸熱水素貯蔵システムの可能性」を見極めることが重要との方向性を見出し、プロジェクトの後半に向けて、その場 TEM 観察や電解水素チャージ法などを活用して研究の展開を図る。</p> <p>材料物性グループでは、主に、希土類金属や鉄などの遷移金属、Al 等の軽元素の高圧下における水素化反応過程を、Spring-8 の放射光等を利用して高濃度水素化物における水素と材料の相互作用を追究し、中でも Al 水素化物の直接反応と吸放出サイクルを観測したことは世界初の研究成果として、先端的な研究を展開中である。</p> <p>計算科学グループでは、PCT 曲線の平衡計算による予測(吸放出温度)、格子欠陥や表面を考慮した水素吸蔵挙動解析(耐久性)、材料中の水素拡散挙動の解析(吸放出速度)、実用性(温度特性、圧力特性)を考慮した新規材料探索などを展開し、これらの成果は独自に開発された計算コードに基づいているもので、他に例を見ない内容である。</p> <p>中性子グループでは、水素貯蔵材料の構造解析等に活用される中性子全散乱装置を開発し、水素貯蔵材料の構造物性研究に向けて供用が開始された。J-PARC の世界最高強度の中性子源により、水素雰囲気中の実験も含めて、結晶質・非晶質の材料中における水素の位置情報・状態解析を通して構造解析手法がさらに高度化される。</p> <p>プロジェクト全体としては、今後、これまでに構築されてきた高度な実験・解析技術を、研究対象の材料の特徴に応じて相互補完的に活用することによって、従来にない水素貯蔵材料開発の指針が得られることが期待される。</p>		
	投稿論文	「査読付き」51件、「その他」8件	
	特許	「出願済」3件 (国内)	
	その他の外部発表 (プレス発表等)	プレス発表：4件、受賞：7件	
Ⅳ. 実用化、事業化の見通しについて	水素貯蔵材料の先端的な基礎研究の成果を実用化に結びつける道筋として、産業界に対して材料開発指針を提供する。H21年度には、世界最高性能を誇る中性子全散乱装置による物質の構造・状態解析の研究基盤や、放射光による高圧・高温など極限環境下における材料研究基盤を初めとする、水素貯蔵材料の研究開発に必要な有効な、様々な実験環境・計算科学的基盤が整い、それらを活用して産業界等との連携を図る。本事業により構築された研究基盤の活用を通して、高圧水素中に		

	<p>おける貯蔵材料の実用特性改善に繋がる基礎研究的知見が提供され、車載用水素貯蔵システム技術開発が加速されることが期待される。</p>	
<p>V. 基本計画に関する事項</p>	<p>作成時期</p>	<p>平成19年3月 制定</p>
	<p>変更履歴</p>	<p>平成20年7月 改訂 (イノベーションプログラム基本計画の制定により、「(1) 研究開発の目的」の記載を改訂) 平成21年3月 改訂 (中間目標、最終目標の詳細化、研究開発項目の分類変更等による改訂)</p>

プロジェクト用語集

研究開発項目①「金属系水素貯蔵材料の基礎研究」

用語	説明
暗視野像	透過型電子顕微鏡において、対物レンズの後焦点面上に形成される回折図形中の回折波を対物絞りを選び、透過波をカットして得られる像。回折を起こしている場所は明るく、回折を起していない部分は暗く見える。明視野像とともに、試料の膜厚測定や格子欠陥の解析に利用される。
エネルギー分散型X線スペクトル (EDS)	電子線を照射して試料から発生した特性 X 線を直接半導体検出器で検出し、電気信号に変えて分光分析する手法。波長分散型 (WDS) と比べ軽い元素 (B: ボロン以下) は分析できないが、検出効率が高い。定量精度は 0.5~5% である。略称は EDS であるが EDX ともいう。
拡散の活性化エネルギー	原子が材料中で拡散 (ジャンプ) するために必要なエネルギー。金属系水素貯蔵材料の場合、水素は結晶格子間サイトを占有するため、水素原子の拡散の活性化エネルギーは材料の結晶構造および水素占有サイトの種類などによって変化する。
金属間化合物	2種類以上の金属元素が整数比で混合してできる化合物。固溶体合金と併せて合金と総称される。一般に、異なる元素の原子どうしは規則的に配置する。(この点で固溶体合金と区別される)
剛性率	弾性率の一種で、せん断弾性率、ずれ弾性率とも呼ばれる。弾性体の正四角柱を考え、底面とそれに平行な面にせん断応力 τ が働くと、正四角柱の側面が頂角 $90^\circ \pm \gamma$ のひし形に変形する。このときフックの法則が成り立つ範囲で $\tau = G\gamma$ という比例関係があり、その係数 G を剛性率とよぶ。単位はパスカル [Pa]。
固溶体合金	2種類以上の金属元素が互いに固溶してつくる合金。固溶可能な組成範囲では、連続的に組成を変化させることができる。
スピナー格子緩和時間	外部磁場の急な変化を与えたとき、核スピン状態の分布に変化が生じてから新しい熱平衡に達するまでの時間を緩和時間といい、とくにスピン系と格子系との間のエネルギー交換により緩和する時間をスピナー格子緩和時間という。金属中の水素の場合、水素原子が格子間サイトをジャンプする頻度と NMR 装置の測定周波数が等しくなったとき、スピナー格子緩和時間は最小値をとる。
その場観察 (in situ) 法	材料に水素を吸蔵させ平衡状態を保ったまま、観察または測定する方法。試料セル (ホルダ) に水素を導入し、吸蔵時の圧力・温度を保持したまま測定する。
中性子全散乱	中性子散乱実験のうち、回折ピークだけでなく、ピークの裾野やバックグラウンドなどの散漫な散乱も精密に測定する

	手法。このデータから、二体分布関数を導くことができる。
転位密度	結晶の単位体積あたりに含まれる転位線長さの総和、すなわち単位面積あたりを貫通する転位の本数。透過電子顕微鏡写真から転位密度を求める場合、転位は三次元的に種々の方向を向いていると仮定して、写真上に二組の平行線を引き、これらの線と転位線の交点の数 N を求め、平行線の長さの総和を L 、試料厚さを t とすると、転位密度は $2N/Lt$ で与えられる (Ham の方法)。
同時係数ドップラー幅広がり (CDB) 法	陽電子の消滅ガンマ線のエネルギースペクトルを高精度に測定し、陽電子の消滅相手の電子が属する元素を同定する手法。欠陥周りの元素を同定することで、詳細な欠陥構造解析が可能。
二体分布関数 (PDF)	2原子間の距離の分布を表す関数で、全散乱データからフーリエ変換により導かれる。関数は、距離 r をもつ原子のペアの数と、該当する元素の (中性子またはX線に対する) 散乱能に比例する。
マジック角回転法(MAS)	試料を強い磁場の中に入れ、磁場の方向に対して 54.7 度傾いた軸の周りで高速回転する方法を言う。固体試料の NMR シグナルは非常に線幅が広くスペクトルの分解能が低いが、マジック角回転法を用いて測定することにより、線幅の狭いシグナルとなり、高分解能スペクトルが得られる。 54.7 度のことをマジック角と呼び、立方体の対角線が各稜線となす角に相当する。MAS は、Magic Angle Spinning の略称である。
ミスフィット転位	格子面間隔の異なる界面で整合性を保つために歪み応力が生じ、これを緩和するために一定の間隔で余分な面が挿入されたり、逆に取り除かれたりしてできる転位。
明視野像	透過型電子顕微鏡において、対物レンズの後焦点面上に形成される回折図形中の透過波 (試料で散乱・回折を受けずに透過してきた波) を対物絞りで選んで結像した像。回折を起こしている場所は暗く、回折を起こしていない部分は明るく見える。暗視野像とともに、試料の膜厚測定や格子欠陥の解析に利用される。
陽電子消滅法	電子の反粒子である陽電子をプローブとし、物質内の欠陥構造や電子の運動量分布を調べる手法。陽電子が物質中の電子と対消滅するとき発生するガンマ線を検出し、陽電子が消滅するまでの寿命 (陽電子寿命測定) や消滅相手の電子の運動量 (同時係数ドップラー幅広がり測定) を計測する。
リートベルト法	粉末回折データから結晶構造を精密化する方法。結晶構造のモデルをもとに、格子定数や原子位置などの構造パラメータから回折パターンを計算し、そのパターンが実測パターンに近づくようにパラメータを最適化する。

リバースモンテカルロ法	液体や非晶質のような乱れた構造をもつ物質の原子配置をモデリングする方法。ある大きさの箱の中に原子を配置し、この配置から導かれる PDF パターンが実測から得られたものに近づくように原子の位置を動かして最適な配置を決める。
BCC 構造	Body Centered Cubic (体心立方) 構造
CBD 比率曲線	研究対象の材料のドップラー幅広がり (CDB) スペクトル(消滅ガンマ線のエネルギースペクトル)を構成元素単体, または基準とする化合物のスペクトルで規格化した曲線。 この曲線には陽電子の消滅相手の電子の属する元素の特徴が反映される。
CDB	Coincidence Doppler Broadening の略 (「同時係数ドップラー幅広がり (CDB) 法」を参照)
EDS	Energy Dispersive X-ray Spectroscopy の略 (「エネルギー分散型 X 線スペクトル(EDS)」を参照)
in situ 法	その場観察法、その場測定のこと。In situ はラテン語で「本来の場所で、そのまま」の意味。(「その場観察 (in situ) 法」を参照)
MAS	Magic Angle Spinning の略 (「マジック角回転法 (MAS)」を参照)
P-C 曲線または P-C-T 曲線	圧力(P)-組成(C) 等温線の呼称。水素貯蔵材料の一定温度下での水素吸蔵・放出平衡特性を示す。
PDF	Pair Distribution Function の略 (「二体分布関数」を参照)

研究開発項目②「非金属系水素貯蔵材料の基礎研究」

用語	説明
イオンビーム分析	試料表面に加速したイオンビームを照射し、散乱されたイオンや原子核、X線、中性子を測定することで、サンプルの構成元素を分析する手法。注目元素の深さ分布測定も可能である。
X線光電子分光分析 (XPS; X-ray Photoelectron Spectroscopy)	試料表面にX線を照射し、生じる光電子のエネルギーを測定することで、サンプルの構成元素とその電子状態を分析する手法。物質のごく表面(数ナノメートル)の元素分布がわかる。また、アルゴンエッチングを適宜行うことで深さ方向の元素分布を知ることができる。
拡散性水素、非拡散性水素	材料中に吸蔵された水素の分類方法の一例。室温で放出されやすい水素を拡散性、されにくい水素を非拡散性と呼ぶ。
核磁気共鳴分析	外部静磁場に置かれた物質中の原子核が固有の周波数の電磁波と相互作用する現象を利用した分析手法。原子核の内部構造、物質の分析、同定の手段として用いられる。共鳴の緩和時間を利用し、コンピューター断層撮影法に応用したものが核磁気共鳴画像法(MRI)として医療に使われている。
環境セルホルダー	電子顕微鏡観察においては試料を真空中に入れ、電子線を透過するなどして拡大像や微少X線を分析するが、環境セルホルダーは隔膜の中に試料を置き、ガス環境することにより、電子線を丸ごと通してガス反応を観察しようとするものである。現在までは生体細胞などの含水物質の応用が考えられていたが、最近ではガス反応の直接観察の試みが始まっている。
高分解能電子顕微鏡法	透過型電子顕微鏡で原子配列を直視できる方法である。結晶の多波干渉を利用して、0.1ナノメートルレベルで原子配列を観察できる。これにより、水素化物の形成・分解反応を原子レベルで知ることが出来る。
昇温脱離分析法	水素を含む試料を一定速度で連続加熱することにより放出される水素をガスクロマトグラフあるいは質量分析器により検出して温度に対する水素の放出速度の変化を測定する方法。測定結果を水素放出曲線と呼び、そこに現れるピークのスペクトラムから材料中の水素の存在状態を推測する。
走査トンネル顕微鏡観察 (STM; Scanning Tunneling Microscope)	非常に鋭く尖った探針を導電性の物質の表面または表面上の吸着分子に近づけ、流れるトンネル電流から表面の原子レベルの電子状態、構造など観測するもの。条件により気体中や液体中での観測も可能である。
第一原理計算	既存の実験結果などの経験的パラメーター等を一切用いない、あるいは実験結果に依らずに行う数値的計算。第一原理計算で扱える原子の数は最大1000個程度であり、アボガドロ定数に遠く及ばないが、種々の近似法を用いることで、タンパク質のような巨大分子も扱えるようになり始めている。

単結晶	結晶のどの位置であっても、結晶軸の方向が変わらないもの。シリコンの単結晶が半導体製造に欠かせないなど、工業的にも重要である。
電位-pH 図	水溶液中の酸化・還元反応の平衡電位と溶液のpHとの関係を示した図。電位とpHの組み合わせにより、材料の腐食・不導態・不変態のいずれかの反応が生じることが読み取れる。
電解水素チャージ	溶液中に二枚の電極を置き、電位差を与えると、溶液の電気分解により発生する、あるいは溶液中に存在する水素イオンの一部が負極側に置いた材料中に侵入する。これを電解水素チャージと呼ぶ。
ナノポーラス	ナノオーダーの均一サイズ孔が規則的に並んだ、ナノサイズ空間の構造をいう。ゼオライトや酸化物などは、機能分離膜や環境浄化、半導体デバイスなど、広い分野へ応用されている。
熱拡散率	物質中の温度の伝わりやすさを示す物理量であり、熱物性値の中で熱膨張係数や熱伝導率と並んで重要である。近年の電気電子機器の高性能化に伴う放熱制御技術や、熱電変換技術に幅広く要求される。
ミリング	試料を粉砕、混合、反応させる方法の一つ。試料とボールと共に容器に入れ、振動あるいは回転運動させることで機械的エネルギーを与え、試料を合成する。
非調和振動	結晶中の格子振動の様子を表す。調和振動であれば、格子は、バネにつながれた物体が振動運動するときと同様の振る舞いをする。一方、調和振動が乱された場合を非調和振動と言う。このとき、物質中の熱の伝導性が減少する減少が見られるなど、熱電変換物質の観点で注目されている。
ラマン分光分析	ラマン散乱光の振動数と入射光の振動数の差(ラマンシフト)は物質の構造に特有の値をとることから、ラマン分光分析は赤外分光分析と同様に分子の構造や状態を知るための非破壊分析法として利用されている。ラマン散乱と赤外線吸収の選択則は異なるため、赤外分光分析とは相補的關係にある。

研究開発項目③「水素と材料の相互作用の実験的説明

用語	説明
圧力マーカー	圧力測定に用いるための標準物質。ダイヤモンドアンビルセルを利用した実験ではルビーを用い、その蛍光を測定することで圧力を測定する。
X線光電子分光	超高真空中で表面試料にX線を照射するとそのエネルギーをもらって電子が放出する。その光電子エネルギーを分析器で測定し表面がどのような結合状態にあるかを分析する方法。
X線磁気円二色性	左円偏光と右円偏光を入射した場合に生じるX線吸収の差分スペクトル。試料が強磁性体あるいはフェリ磁性体の場合に観測される。スペクトルから電子の軌道（とスピン）磁気モーメントを検出することができる。
X線反射率法	全反射領域の近傍での単色X線の反射率の角度分布、もしくは固定入射角度での白色X線の反射スペクトルを測定することによって、表面のナノ形状や薄膜内部の「埋もれた」ナノ構造、特に密度（深さ分布含む）や薄膜の各層の厚さ、表面・界面ラフネス等の深さ方向の情報を非破壊的に得ることができる。
エネルギー分散型X線回折	白色X線を入射光とし、検出器にエネルギー分散可能な半導体検出器を用いることで、粉末X線回折パターンを収集する測定方法。高温高圧その場観察実験等において用いられる。
化学シフト	電子分光の用語では、原子を構成する電子が核から束縛される強さ（エネルギー）が、化合物や結晶を形成することにより、自由な状態と比較するとその値が僅かに変化すること。この化学シフトから分子の結合状態がわかる。 NMRの用語では、化学的環境の違いに起因する共鳴周波数の移動のことである。化学シフトは試料の構造情報として利用することが可能である。
核共鳴前方散乱	放射光核共鳴散乱法において、電子系との相互作用による原子核準位の超微細構造を測定する一手法。プローブ核の局所電子状態の情報（磁性や電場の偏り等）が得られる。
核共鳴非弾性散乱	放射光核共鳴散乱法において、核励起とフォノン励起の同時励起過程を測定する手法。プローブ核を含む原子の局所振動状態についての情報（フォノンの状態密度等）が得られる。
角度分解光電子分光	物質に単色光を照射し励起・放出された光電子のエネルギーと角度の分布を測定することによりバンド構造を調べる実験手法。従来は真空紫外光以下の励起光による測定が行われていたが、より高エネルギーの軟X線による角度分解光電子分光が近年行われるようになっている。
ガasket	ダイヤモンドアンビルセルで試料を封入するために用いる金属板。中央に微少な穴を開けてその中に試料を入れる。

角度分散法	単色 X 線を入射して回折パターンを測定する方法。高温高压その場観察実験では、X 線透過率の高い立方晶窒化ホウ素を圧力発生のためのピストン（アンビル）に使い、二次元検出器であるイメージングプレートで X 線回折パターンを記録する。
吸収端	L1 および K 吸収端では主に s 軌道から p 軌道への電子遷移、L2 および L3 吸収端では p 軌道から d 軌道への電子遷移が生じる。この領域で XAS を測定した場合、それぞれ遷移先の電子殻における非占有状態密度が検出される。
光電子分光	物質に一定エネルギーの電磁波をあて、光電効果によって外に飛び出てきた電子（光電子とよばれる）のエネルギー分布を測定することにより内殻準位や価電子帯の電子状態を調べる実験手法。
質量分析装置	真空装置中のガス分子をイオン化して、その質量数を区別して検出する機能をもつ装置。真空装置に装着する分析管、RF 電源、制御電源、計測用 PC から構成される。分析管では、ガス分子を電子衝撃でイオン化し、RF 交流電位を印加した六極電極中を飛行させることで質量数を選別し、検出器に入るイオンの数を電圧パルスの数に変換して、横軸に質量数、縦軸に計数レートを表示して質量スペクトルとする。
四面体サイト	金属格子が最密構造（面心立方、六方最密）をとる時、八面体と四面体の空間が 1 対 2 の割合で生じる。四面体の中にある水素を、四面体サイトの水素と呼ぶ。
弱（強）強磁性	磁性をもつ電子バンドはアップスピンバンド(majority)とダウンスピンバンド(minority)に偏極が生じている。強強磁性はアップスピンバンドに空きがない状態であり、弱強磁性はアップスピンバンドとダウンスピンバンドの両方に空きがある。単純金属の場合、Co と Ni が強強磁性に分類され、Fe は弱強磁性である。
集束イオンビーム化学気相成長法	原料ガス雰囲気下で集束したイオンビームを位置制御することにより、任意の材料で任意形状の立体ナノ構造を形成することができるナノ構造形成方法。ビームに用いたイオンをコアとする構造物が作成されるので、様々な機能性を付与することもできる。
昇温脱離ガス分析	試料を真空中で加熱し、表面温度を一定の速度で昇温する際に表面から脱離する原子・分子を質量分析装置で検出する分析方法。ある質量のガス分子につき、横軸に表面温度、縦軸に単位時間に検出したイオンの強度を表示したものが昇温脱離スペクトルである。吸着分子や物質の熱分解過程について情報を得ることができる。
昇温脱離質量分析	昇温脱離ガス分析に同じ。

スパッタリング	真空中で加速した希ガスや反応性のガスを表面試料に衝突させ、表面に吸着した化学種を弾き飛ばす方法。表面の清浄化に用いられる。
スピン-格子緩和時間	緩和とは NMR により励起された系がエネルギーを放出し、熱平衡状態に戻る過程である。スピン-格子緩和は、磁気モーメントが格子にエネルギーを放出しておこるため、原子拡散などの内部運動の時間的な変化に強く依存する。この時間を測定することにより、原子のジャンプ頻度を導くことができ、原子の拡散の指標として用いることができる。
高压セル	高压合成では試料・試料容器・加熱用ヒータと電極および圧力媒体からなる、高压実験パーツ群のこと。セルのデザインにより到達可能温度圧力が変わるため、実験に条件に合わせた最適化が常に必要となる。
全電子収量法	内殻光吸収の測定法。光吸収により試料から放出された電子の総量をエネルギー選別せずに測定する。
走査型トンネル顕微鏡	非常に鋭く尖った金属探針を導電性の物質の表面または表面上の吸着分子に近づけ、探針に流れるトンネル電流から表面の電子状態、構造などを原子レベルで観測する装置。
ダイヤモンドアンビルセル	1 対のダイヤモンドを用いて、その間に試料を挟み込んで試料を圧縮する装置。加圧できる試料の大きさは他の加圧装置と比較して微少であるが、数 100 万気圧までの加圧が可能である。
弾性反跳分析法	MeV 程度の高エネルギーイオンを固体試料に入射すると試料中の原子が反跳される。反跳原子は質量に対応したエネルギーをもつ。それゆえ、反跳原子のエネルギーを測定すると、試料を構成する原子の質量を決定でき原子種を同定することができる。RBS では水素の含有量を求めることができないため、本法が用いられる。
超音速分子線	数気圧のガスを直径 0.1mm 以下程度の小穴から真空中に噴出させて得られる高速の分子ビーム。噴出する際にガスが断熱膨張するため、ガス分子の振動・回転エネルギーが極低温になり、その内部エネルギー減少分が並進運動エネルギーに転化されて高速化する。その極低温での音速に比べて分子ビームの速さが数十倍になるため、「超音速」分子線と呼ばれる。
低速電子線回折	試料表面に 200eV 以下の低い速度エネルギーの電子線を入射させ、後方散乱された電子の回折パターンから表面構造を観測する方法。
内殻光吸収分光	単色光の照射により内殻から非占有準位へ電子励起された光吸収のエネルギー分布を測定し、非占有準位の電子状態を調べる実験手法。
内部磁場	核共鳴散乱測定におけるプローブ核の準位の分裂をもたらしている核位置の磁場のこと。プローブ核の局所磁気モーメントや外部から印加した磁場に連動して変化する。

内部転換計測法	核共鳴散乱過程において生じる、内部転換電子を計測する手法。原子核準位の超微細構造が測定できるため、プローブ核の局所電子状態の情報(磁性や電場の偏り等)が得られる。
ナノコンポジット材料	数種の材料を複合(コンポジット)化して、その組織や材料間の界面がナノレベルで制御された、各々の材料単体では現れない革新的な特性を持つ材料のこと。
軟 X 線	約 0.1 - 2keV のエネルギーを持つ電磁波。この領域の光をエネルギー連続的に供給できるのは、シンクロトロンだけである。軟 X 線は元素の内殻励起を起こすために非常に反応性に富み、透過性が弱い。
八面体サイト	金属格子が最密構造(面心立方、六方最密)をとる時、八面体と四面体の空間が 1 対 2 の割合で生じる。八面体の中にある水素を、八面体サイトの水素と呼ぶ。
発光分光	単色光励起に伴った光学遷移により放出された光を分光し、物質の電子状態を調べる実験手法。
パリ・エディンバラ式高圧装置	機械的な固体圧縮の手法で 1 GPa 以上の超高压を発生させるための高圧装置の一種。1 対のアンビルと呼ばれる超硬材料で作られた円錐台形状部品に試料を挟み、小型の油圧プレスで圧縮する。アンビルやガスケット形状、プレス強度など、多くの工夫がなされており、放射光や中性子と組み合わせて多くの研究が行われている。パリ大学とエディンバラ大学の研究者が共同開発したところから、この名称がある。
反結合軌道	原子間における電子の結合形態の一つ。水素原子の場合、位相が反転した 1s 波動関数の重ね合わせで生じた結合が反結合軌道であり、これは励起状態である。位相が同じ波動関数の重ね合わせは結合軌道とよばれ、こちらが基底状態となる。
バンド構造	結晶中の電子が取ることの出来るエネルギーと波数との関係を示した曲線。
フェルミエネルギー	フェルミ統計に従う粒子系の絶対零度での化学ポテンシャル。
部分状態密度	物質を構成する元素の各サイト・軌道からの状態密度への寄与を示したもの。
ポリクロメーター	回折した X 線が焦点を結ぶように湾曲させた分光結晶のこと。Si 結晶が用いられている。エネルギー分散型 XAFS 測定で使用される。
マシニングセンタ	主として回転工具を使用し、工具の自動交換機能(タレット形を含む。)を備え、工作物の取付け替えなしに、多種類の加工を行う数値制御工作機械。(JIS 規格 工作機械—名称に関する用語(JIS B 0105)より抜粋)
メスバウアー分光	原子核から反跳を伴うことなく γ 線が放出され、同種原子核により同じく反跳なしに共鳴吸収される現象でドイツの物

	理学者メスバウアーが Ir について発見した現象で、彼は 1961 年にノーベル物理学賞を受けた。核準位は固体中の電子状態（原子配置，結合状態）によってわずかに変化を受けているから、放射体か吸収体の一方を mm/s の桁の速度で動かし、ドップラー効果によって共鳴吸収の位置、幅、あるいはスペクトルが求められる。スペクトルは励起準位の寿命を示す幅をもったローレンツ型成分からなり、ドップラー速度を横軸にした吸収曲線で表現される。吸収に次ぐ放射 γ 線、X 線あるいは内部転換電子を測定して発光スペクトルを得ることもある。スペクトルは試料の核位置の s 電子密度を示す異性核シフト、核スピンの周囲から受けた内部磁場による核ゼーマン分裂、核 4 極子モーメントが結晶電場勾配によって生じる 4 重極分裂 (quadropole split) などの量を含み、固体の結合に関する電子状態、原子配置、相の分布や比率、電氣的、熱的、磁氣的状態を知る手段となる。
ラザフォード後方散乱法	ヘリウムなどの軽元素イオンを加速器を用いて高速で試料に衝突させて、試料中の原子核に衝突してはね返ってきたイオンのエネルギーの大きさを測定することで、相手元素やその分布などを分析する方法。標準試料なしで絶対定量が可能だが、水素は後方散乱しないために測定できない。
ラマン散乱	光が物質に入射した時、固体や分子中の原子振動等により光が変調され、原子の振動数だけ、もとの光の振動数とは異なる振動数の光として観測される。振動数のずれ（原子の振動数）はラマンシフト/cm-1 で表される。材料中の、水素の振動を観測することにより、金属—水素の相互作用に関する情報が得られる。
ルビー蛍光測定装置	ダイヤモンドアンビルセル中の発生圧力を測定する装置。微少なルビー片を試料と一緒に封入して、ルビーにレーザーを照射したときに発生する蛍光を測定することで圧力を測ることができる。
レナード・ジョーンズ・ポテンシャル	2 つの原子間の相互作用ポテンシャルエネルギーを表す経験的なモデルから決められるポテンシャル。
DAC	Diamond Anvil Cell の略称。ダイヤモンドアンビルセルのこと。
DXAFS	Energy Dispersive XAFS の略称。エネルギー分散型 XAFS。ポリクロメーターの焦点に試料を置き、位置敏感型検出器で XAFS スペクトルの測定を行う。ミリ秒の時間分解能での測定が可能である。
ERDA	Elastic Recoil Detection Analysis の略称。弾性反跳分析法のこと。
FEFF8.4	多重散乱理論による X 線吸収スペクトルをシミュレーションする計算コード。

FIB-CVD	Focused Ion Beam-Chemical Vapor Deposition の略称。集束イオンビーム化学気相成長のこと。
HXPES	Hard X-ray photoemission spectroscopy の略称。硬 X 線を励起光として用いた光電子分光のこと。
JRR-3	Japan Research Reactor No.3 の略称。日本原子力研究開発機構 東海研究開発センター内に設置されている研究用原子炉施設。初の国産研究炉で、出力 20MW。種々の中性子ビーム実験、原子力燃料・材料の照射試験、ラジオ・アイソトープやシリコン半導体の製造などが行われている。
NEXAFS	Near Edge X-ray Absorption Fine Structure の略称。X 線吸収端近傍微細構造。X 線吸収の内、吸収端付近に現れる微細構造、または分光法を指すこともある。対象元素の価数など電子状態の情報を得ることができる。
RBS	Rutherford Backscattering の略称。ラザフォード後方散乱法のこと。
SXPES	Soft X-ray Photoemission Spectroscopy の略称。軟 X 線を用いた光電子分光のこと。
white-line	白色線。一般に狭いエネルギー範囲で大きな吸収が生じるスペクトル構造をいう。主に L2 および L3 吸収端の X 線吸収スペクトルで観測され、d 電子の非占有状態密度に対応する。
XAFS	X-ray Absorption Fine Structure の略称。X 線吸収微細構造。X 線吸収スペクトルで吸収端近傍から高エネルギー側に出現する微細な構造のこと。吸収端近傍を NEXAFS、吸収端より数十 eV より大きなエネルギー領域のものを EXAFS (Extended XAFS) という。EXAFS には近接原子間距離、配位数などの局所構造の情報が含まれる。
XAS	X-ray Absorption Spectrum の略称。X 線吸収量の X 線エネルギー依存性。X-ray Absorption Spectroscopy (X 線吸収分光法) の略語としても使用される。
XMCD	X-ray Magnetic Circular Dichroism の略称。X 線磁気円二色性のこと。
XRR	X-ray Reflectivity の略称。X 線反射率法のこと。

研究開発項目④

「計算科学による水素貯蔵材料の基盤研究」

用語	説明
格子欠陥	単結晶から外れた構造の乱れの総称で、欠陥の連続性によって0次元欠陥から3次元欠陥まで考えられる。0次元欠陥（点欠陥）には原子欠損や格子間原子、1次元欠陥には転位、2次元欠陥には粒界や表面、3次元欠陥にはアモルファス領域などがある。
水素誘起アモルファス化	アモルファス(非晶質)は結晶のような長距離秩序はないが短距離秩序はある物質の状態、熱力学的には自由エネルギーの極小（非平衡準安定）状態にある。水素誘起アモルファスは、水素が吸蔵されてアモルファス化が起きる現象のこと。
第一原理計算	実験結果に基づくパラメーターを用いることなく、対象とする系の物性値を求めことのできる計算手法の総称。本プロジェクトではこの計算手法を適用し、水素貯蔵材料の安定構造、吸着エネルギー、相図を求め、新しい水素貯蔵材料を探索している。
ハイドレート	ガス分子を中心にして周囲を水分子が囲んだ形になっている固体結晶。低温かつ高圧の条件下で、水分子は立体の網状構造を作り、内部の隙間にガス分子が入り込み氷状の結晶になっている。本プロジェクトでは水素分子を取り込んだ水素ハイドレートを扱い、ハイドレート構造の安定性、添加剤分子を入れたときの水素分子数の圧力依存性などを調べた。
分子動力学法	原子配置から各原子間に働く力を計算し、運動方程式を解くことによって原子の位置と速度の時系列データを得る方法。原子に働く力を古典ポテンシャル関数から求めるのが「古典分子動力学法」、第一原理的に求めるのが「第一原理分子動力学法」である
マイクロ孔金属錯体物質(MOM)	適切な剛直有機配位子と配位方向が規定された金属クラスターを選択することにより得られる、金属イオンまたは金属クラスターを剛直な有機分子で繋ぎポーラスを持つ結晶性化合物。大きなポーラス、単位重量あたり大きな表面積をもつなどガス貯蔵材料として適しているが、水素分子の吸着が物理吸着であり、実用化にはその吸着エネルギーを大きくする課題がある。 (有機金属構造体(MOF)と同様)
モンテカルロ法	シミュレーションや数値計算を乱数を用いて行なう手法の総称。分子シミュレーション分野では各原子の座標を乱数で発生させるモンテカルロ法がよく行われる。
有機金属構造体(MOF)	適切な剛直有機配位子と配位方向が規定された金属クラスターを選択することにより得られる、金属イオンまたは金属クラスターを剛直な有機分子で繋ぎポーラスを持つ結晶性化合物。大きなポーラス、単位重量あたり大きな表面積をもつなどガス貯蔵材料として適しているが、水素分子の吸着が物理吸着であり、実用化にはその吸着エネルギーを大きくする課題がある。 (マイクロ孔金属錯体物質(MOM)と同様)

ラーベス相	ある組成の金属の組合わせで生じる金属間化合物の相である。ドイツの鉱物学者、フリッツ・ラーベスから名付けられた。2種類の金属 A、B の原子半径の比が $r_A/r_B=1.225$ に近いとき、金属 A と金属 B の間に AB_2 の組成の金属間化合物の結晶が生じる。
粒界	2つの単結晶領域が接する界面のこと。2つの異なる結晶方位（あるいは結晶構造）が接するため、粒界では必ず構造の乱れが伴う。原子配置の整合性が良い場合には界面エネルギーは低く安定で、界面の構造は単純な転位列等で記述できる。対応粒界や対称傾角粒界がそれに当たる。整合性が悪い場合はランダム粒界と呼ばれ、原子配列の乱れが厚さ 1nm 程度の領域まで及び、界面エネルギーは高い。
EAM	Embedded Atom Method（原子埋め込み法）の略で、主に金属原子間の相互作用を表す多体ポテンシャル関数の一つ。自分の周りの原子が作る電子密度と、そこに自分自身（原子）を埋め込む際のエネルギーを「埋め込みエネルギー」として記述する。一般に二体項と組み合わせて用いる。
PCT 曲線	圧力-組成等温線。水素貯蔵材料においては、ある温度において、水素圧に対してどれだけ水素が入るかを示す曲線。

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」

用語	説明
結晶構造解析	中性子線、X線または電子線が、試料の原子配列により回折される様子を観測し、回折の強弱により生じるパターンから原子配列を決定する解析。原子配列に規則性がある場合、つまり結晶に適用される。
大強度陽子加速器施設 (Japan Proton Accelerator Research Complex, J-PARC)	茨城県那珂郡東海村において、高エネルギー加速器研究機構と日本原子力研究開発機構が共同で建設した世界最大級の陽子加速器施設。パルス中性子源施設のほか、ミュオン施設、ハドロン施設、ニュートリノ施設等からなり、宇宙の起源を探る基礎研究から材料開発を念頭においた材料研究まで、幅広い研究が展開される。
ディスクチョッパー	一部に中性子遮蔽を塗布した円盤状の回転体を、パルス中性子の発生周期に同期させて回転させることで、不要な長波長中性子を除去するデバイス。
T0(ティーゼロ)チョッパー	鉄系の遮蔽体をパルス中性子の発生周期に同期させて回転させ、高速中性子を除去するデバイス。
中性子回折	中性子は波の性質を持つので、原子をかすめた時に、幾何学的に直進せずに回り込む現象が起きる。これを中性子回折と呼ぶが、原子の配列と波長がブラッグの条件またはラウエ条件を満たす方向に強い回折線が現れる。
中性子全散乱法	中性子による回折パターンをフーリエ変換することで、二体分布関数を求め、原子間距離や配位数を導出する手法のこと。原子配置に規則性のない液体やガラスの研究に主に用いられてきたが、結晶における乱れや揺らぎの解析方法としても適用されはじめている。
同位体置換法	中性子に対する原子の散乱断面積は、同位体によっても異なる。これは、散乱断面積が原子核の構造に依存するためである。同位体の化学的性質が近い事を利用し、試料中の元素を同位体で置換すると、異なる回折パターンを得る事ができ、パターンの変化から特定の元素の位置の特定が可能である。中性子回折に特有の手法で、主に液体やガラスの構造研究で用いられる。
二体分布関数 (Pair Distribution Function, PDF)	ある原子を座標原点としたときに、原子間距離をパラメーターとして他の原子の存在頻度を表す関数。
飛行時間法	中性子源において、中性子が発生した時間を原点として、検出器により検出されるまでの時間を測定すると、中性子源から検出器までの距離が既知であるので、中性子の速度が計算できる。中性子はドブロイ波であるので、速度から波長、波数、運動量遷移量やエネルギー遷移量等が計算できる。ただし、どのような値が測定できるかは、測定装置に依存する。

パルス中性子源	加速器により加速された電子または陽子を物質に照射し、核破砕反応により中性子を取り出す中性子源のこと。照射に同期して中性子が発生するため、時間に対してパルス状に中性子が発生する。パルス状に発生するため、発生から検出までの中性子飛行時間を測定でき、中性子の速度が求められる。ちなみに原子炉中性子源では、連続的に中性子が発生する。
フェルミチョッパー	パルス中性子源から発生する白色中性子を単色化するデバイス。回転体に中性子遮蔽材で構成するスリットを挿入した形状で、これを中性子の発生に同期させて回転させ、スリットが中性子ビームラインの平行になったときにのみ、中性子がスリットを透過する。回転位相を、必要な中性子の速度(=波長)に合わせることで、任意の中性子を単色化できる。
ヘリウム-3 (He-3) 中性子検出器	中性子を、検出器内のヘリウムガス(He-3)が吸収し、陽子とトリトンを放出することで荷電粒子に変換し、電気信号として検出する。
リートベルト解析	回折パターンに対して、結晶構造パラメーター(分率座標、占有率、原子変位パラメーター)と格子定数を最適化する方法。初期値となるパラメーターを与える必要がある。
リバースモンテカルロ (Reverse Monte-Carlo、RMC)法	計算機上で原子配置を構成し、原子配置から計算される回折パターンと実測を比較し、モンテカルロ法により原子位置を変えながら実測パターンを再現する原子配置を求める方法。
GEM(Gas Electron Multiplier)検出器	ホウ素により中性子をアルファ粒子に変換し、電気信号として検出する。ポリイミドにホウ素の同位体(^{10}B)を蒸着して使用しているのが特長。ヘリウムガスではなく、ホウ素の用いることで空間分解能や計数率の向上を実現している。
Placzek 効果	水素のような軽元素は、中性子と質量が近いために、中性子が原子より散乱される際に生じる反跳がおきやすい。散乱過程で生じる反跳により回折パターンが変形してしまうことを Placzek 効果と呼ぶ。特に液体や気体のように原子が自由に動く事ができる状態の構造解析では Placzek 効果が無視できない。Placzek 効果は、軽水素と重水素でも程度が異なり、一般的には重水素の方が補正が容易である。

I. 事業の位置付け・必要性について

1. NEDOの関与の必要性・制度への適合性

1.1 NEDOが関与することの意義

【政策上の位置付け】

「低炭素社会づくり行動計画」（平成 20 年 7 月）では、排出量のうち約 2 割を占める運輸部門からの二酸化炭素削減を行うため、次世代自動車（ハイブリッド自動車、電気自動車、プラグインハイブリッド自動車、燃料電池自動車、クリーンディーゼル車、CNG自動車等）について、2020 年までに新車販売のうち 2 台に 1 台の割合で導入するという目標の実現を目指すとしている。

「環境エネルギー技術革新計画」（平成 20 年 5 月）では、低炭素社会実現に向けた我が国の技術戦略において、需要側技術として燃料電池自動車を、また、水素利用については効率的な水素貯蔵・輸送技術、化石燃料に依存しない水素製造の低コスト化等を、開発の必要な技術として位置付けている。

「Cool Earth - エネルギー革新技術計画」（平成 20 年 3 月）では、世界全体の温室効果ガスの排出量を現状に比して 2050 年までに半減するという長期目標を達成するために選定された、エネルギー分野における 21 の革新的技術開発に、燃料電池自動車、水素製造・輸送・貯蔵が含まれている。

「エネルギー基本計画」（平成 19 年 3 月改定）では、多様なエネルギーの開発、導入及び利用の施策の一つとして、燃料電池自動車に関する技術開発の推進が挙げられている。燃料電池本体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製造・貯蔵・輸送技術の確立が不可欠であり、こうした課題解決に向けた技術開発・実証研究を引き続き推進すること、と定められている。

「新・国家エネルギー戦略」（平成 18 年 5 月）では、2030 年に向け運輸部門の石油依存度が 80%程度となることを目指し必要な環境整備を行うことを目標として、燃費改善、燃料多様化とともに、電気・燃料電池自動車等の開発・普及促進が掲げられている。

いずれにおいても、燃料電池自動車が、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・貯蔵技術が重要課題と位置付けられている。

【研究開発政策上の位置付け】

経済産業省は、政策を踏まえて、全ての研究開発プロジェクトを 7 つの「イノベーションプログラム」の下で体系的に推進している。そのうちの一つ「エネルギーイノベーションプログラム」に、「水素貯蔵材料先端研究基盤事業」（以下、本事業という）は含まれている。

我が国が持続的発展を達成するためには、革新的なエネルギー技術の開発、導入・普及により世界に先んじて次世代型のエネルギー利用社会の構築に取り組むことが不可欠であるが、エネルギー技術開発には長期期間と大規模投資を必要とするとともに将来の不確実性が大きいことから、民間企業が持続的に取り組むことは容易ではない。「エネルギーイノベーションプログラム」は、政府が長期を見据えた将来の技術進展の方向性を示し、官民双方が方向性を共有し、長期にわたり軸のぶれない取組の実施を可能にすることを目指して、制定されている。

「エネルギーイノベーションプログラム」は、5つの柱、総合エネルギー効率の向上、運輸部門の燃料多様化、新エネルギー等の開発・導入促進、原子力等利用の推進とその大前提となる安全の確保、並びに、化石燃料の安定供給確保と有効かつクリーンな利用、から構成されている。本事業は、運輸部門の石油依存度を2030年度までに80%程度とすることを旨とする、運輸部門の燃料多様化のための研究開発施策として位置付けられているとともに、他の3つの柱、総合エネルギー効率の向上、新エネルギー等の開発・導入促進、化石燃料の安定供給確保と有効かつクリーンな利用にも寄与する研究開発施策として位置付けられている。

【NEDO 事業としての妥当性】

燃料電池自動車の普及、水素の供給には、技術進展だけでなく、制度の整備、インフラストラクチャの建設、社会的な理解推進・受容が必要である。そのために、上述したように重要な政策として位置付けられるとともに、技術開発と制度があわせて検討されている。そのため、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する NEDO の関与が不可欠である。具体的には、本事業の推進とあわせて、例えば、「水素社会構築共通基盤整備事業」では安全の確認、規制の再点検に必要な技術開発、データ収集、規制当局へのデータ提供等を行うとともに、社会的受容性、水素ステーションコストの試算等を NEDO が調査して、本事業を支援している。

燃料電池と水素製造・貯蔵・輸送の開発・普及は、複数の研究事業を連携・整合して進めることが必要であることから、NEDO の関与は不可欠である。具体的に、「水素製造・輸送・貯蔵システム等技術開発」、「水素先端科学基礎研究事業」等の関連事業の委員会には、各プロジェクトリーダーが相互に乗り入れる等により、緊密な情報交換の手段を講じて連携の推進を図っている。

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、我が国一国だけで成し遂げられるものではなく、また、世界的な広がりがあるからこそエネルギー・環境に大きな効果をもたらすものである。国際的な関係の構築においても、NEDO の関与は有効である。例えば、本事業においては、NEDO 燃料電池水素技術開発部、産業技術総合研究所エネルギー技術研究部門、米国ロスアラモス国立研究所水素燃料電池研究所の間で情報交換等に係る覚書を

締結しているが、NEDO は米国エネルギー省担当部署との折衝を経産省と連携して担った。また、国際エネルギー機関の水素協定に NEDO が参加し、その協定の annex の一つにおいて、日本側責任者として秋葉 PL が水素貯蔵材料に係る情報交換等をリードするとともに、必要に応じて関係者に情報を展開している。

【本事業開始に向けた NEDO の準備】

NEDO は、「水素安全利用等基盤技術開発」（平成 15 年度～19 年度）においても、水素貯蔵に係る技術を網羅的に取り上げて絞り込んでいくという方式を採用し、十以上のテーマを NEDO が個別に委託して実施した。そのため、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との評価を受けた一方で、研究管理体制について工夫が必要であるとの指摘を受けた。また、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と反省があった。

一回の水素供給による自動車走行距離が 500km という最低限の目標が、高圧水素タンクの技術開発進展によって達成されるに至った。ただし、コスト低減、エネルギー効率向上の観点から高圧水素タンクを越える技術の必要性を、産業界より要望された。

水素貯蔵技術に関する取組を検討するために、NEDO は、平成 17 年 6 月に関係者含み 50 人規模での連絡会を開催、平成 17 年 11 月から平成 18 年 5 月にかけて 20 名規模の懇話会を 3 回開催し、平成 18 年 11 月に専門家による意見交換会を開催した。これらを踏まえて、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ことを目的としたワークショップを、平成 19 年 1 月に開催した。なおその場において、本事業のプロジェクトリーダーとして、NEDO が産業技術総合研究所秋葉氏を指名した。

これらの検討過程を通じて、NEDO は次の 3 点に留意して、本事業の計画・体制の構築に努めた。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、強力なプロジェクトリーダーの存在が有効であること、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、である。

【NEDO 関与の意義】

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する、並びに、燃料電池と水素製造・貯蔵・輸送の開発・普及に係る複数の研究事業を連携・整合して進めるとの観点から、NEDO の関与は不可欠である。また、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・環境に大きな効果をもたらすものであり、国際的な関係の構築において NEDO の関与は有効である。さらに、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である。

1.2 実施の効果（費用対効果）

「環境エネルギー技術革新計画」（平成 20 年 5 月）では、2030 年における世界市場規模を、燃料電池自動車では 3 兆円以上、水素貯蔵輸送では 3,000 億円未満と予測している。予測根拠が明示されていないが、2030 年時点で、例えば、燃料電池自動車の生産台数を 100 万台と仮定し、一台の価格が 300 万円（現状では数千万円）とすると 3 兆円となり、自動車搭載の水素貯蔵システムが 10 万円（現状では 300～500 万円）とすると 1,000 億円となる。2008 年の世界の自動車生産台数が約 7,000 万台であることから、燃料電池自動車が普及するとすれば、年間数百万台の生産は期待できることから、水素貯蔵システムの市場規模も数千億円と期待できる。

また、水素貯蔵材料はニッケル水素電池用の電極材料として商品化されており、同材料の最大市場となっている。その市場規模は、ニッケル水素電池として、2008 年（暦年）実績で 1,277 億円である（統計値：電池工業会）。

本事業の開発予算を、表 I .-(1)に示す。H19 年度～H21 年度までの 3 年間の予算総額は、約 31 億円である。これまでに、研究設備としては、J-PARC に構築中の中性子全散乱装置関連、SPring-8 のビームライン用実験装置（高圧実験用など）、各研究機関における実験室系の分析・試料作成装置群、ならびに計算装置等が導入された。このように、主に水素貯蔵材料の構造物性測定用や反応機構解析用などを初めとする実験装置群、ならびに計算科学的なアプローチを進展させるためのハード群といった、水素貯蔵材料に関する基本原理を解明するための研究環境が着実に整えられ、実質的な研究活動に活用されているところである。

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

2. 事業の背景・目的・位置づけ

2.1 事業の背景

前述したように、政策的には、燃料電池自動車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・貯蔵技術が重要課題と位置付けられている。政策を踏まえて経済産業省が制定した「エネルギーイノベーションプログラム」に、本事業は含まれている。「エネルギーイノベーションプログラム」は、5つの柱、総合エネルギー効率の向上、運輸部門の燃料多様化、新エ

エネルギー等の開発・導入促進、原子力等利用の推進とその大前提となる安全の確保、並びに、化石燃料の安定供給確保と有効かつクリーンな利用から構成されており、本事業は、原子力を除く4つの柱に寄与する研究開発施策である。

燃料電池自動車の普及のためには、燃料電池自動車自体の開発と同時に、燃料である水素を安全かつ効率的に利用供給するための技術開発が不可欠である。特に、コンパクトかつ高効率な水素貯蔵・輸送技術の確立は、水素社会実現のキーテクノロジーとして重要である。水素貯蔵材料に関して我が国は世界トップレベルの技術力を有しており、水素貯蔵材料を本格的に実用化・普及するため、また、我が国産業競争力を維持・強化するために、世界の先頭にたつて、科学的な視点からのブレークスルーを達成して、水素吸蔵能力をはじめとする実用的性能を大幅に向上、改善させる必要がある。

また、燃料電池車普及についての中期的な視点としては、燃料電池実用化推進協議会(FCCJ)が平成20年7月4日に発表した、「FCVと水素ステーションの普及に向けたシナリオ」において、2015年が普及開始の年と位置づけられている。このため、FCV用の水素貯蔵技術の確立も急がれることから、当面は先行技術である圧縮水素容器技術との2本立てにより技術開発が進められているところである。一方、それ以降の中長期的な視点としては、産業競争力懇談会(COCN)が平成20年12月3日に発表した中間報告の中で、「低炭素モビリティへのステップ」として、2030年が「燃料電池車普及の過渡期」から「カーボンフリー化への過渡期」への移行時期と位置づけられている。

燃料電池車がそのような過渡期を乗り越えて普及していくためには、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として、水素貯蔵材料の実用普及が期待されている。このように、本事業は、今世紀半ばまでを見通した低炭素化の取り組みに対しても、水素貯蔵材料の基礎研究の側面からその効果が期待されるものであり、経済効果のみならず、エネルギーセキュリティ問題や、地球温暖化対策の側面からも重要な効果をもたらすものである。

2.2 事業の目的

燃料電池自動車の燃料として期待されている水素は、様々なエネルギー資源から製造されるエネルギー媒体である。水素は圧縮ガスとして現在は輸送貯蔵される場合が多いが、室温で数十気圧以上の圧力では超臨界状態となり、圧縮する効率が圧力と共に低下することが知られている。また、圧力容器に使われている材料には高価かつ再利用しがたいとされるものもあって、圧縮ガスよりもより優れた水素の輸送貯蔵法が求められている。

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、水素貯蔵材料の有用性に関しては論を待たないが、実用化・普及のためには水素貯蔵能力等の大幅な性能向上が必要である。車載用には5～6質量%以上の高い水素貯蔵量、

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）、実用に足る反応速度および十分な耐久性などが求められる性能である。また、水素貯蔵材料は1970年初頭にその概念が示された材料であり、そのわずか20年後にはニッケル水素電池用の電極材料として商品化されたという経緯がある。短期間で商品に結びつける必要に迫られて、材料としての基礎研究は発見以来の40年弱の間、十分になされてきたとは言い難い。これらの材料開発にあたり水素貯蔵材料に関する基本原理から解明し、それに基づいて応用技術の発展を図らなければ、ブレークスルーはもたらされない。

本事業では、高性能かつ先端的水素貯蔵材料開発に必要な水素貯蔵に関する基本原理の解明及び材料の応用技術に必要な基盤研究を幅広い分野で横断的に行い、水素貯蔵材料の基本原理の解明、計算科学等材料研究への応用技術の基礎を確立する。それにより得られた成果を水素貯蔵材料の開発指針として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する。

2.3 事業の位置づけ

NEDOは、平成21年度現在、本事業の他、「水素製造・輸送・貯蔵システム等技術開発」「水素先端科学基礎研究事業」「水素社会構築共通基盤整備事業」「燃料電池システム等実証研究」と併せて、5つの事業を推進している。水素貯蔵材料・貯蔵システムについては、「水素安全利用等基盤技術開発」（平成19年度終了事業）および後継事業である「水素製造・輸送・貯蔵システム等技術開発」の中で実施しており、本事業は後者の水素貯蔵材料関連プロジェクトと密接に連携しつつ、推進している。

産業界等における水素貯蔵材料の開発を通しての代表的な実用化・応用先としては、燃料電池自動車（FCV）用の水素貯蔵容器を想定している。具体的には、「NEDO 燃料電池・水素技術ロードマップ2008(平成20年6月)」の「水素貯蔵技術ロードマップ」（図I-(1)）に示すとおり、燃料電池自動車用の、水素貯蔵材料を内蔵した高圧水素容器、すなわちハイブリッド容器である。NEDOはこのロードマップにおいて、本事業を革新的な水素貯蔵材料に必要とされる貯蔵メカニズムを解明するための基盤研究に位置づけている。

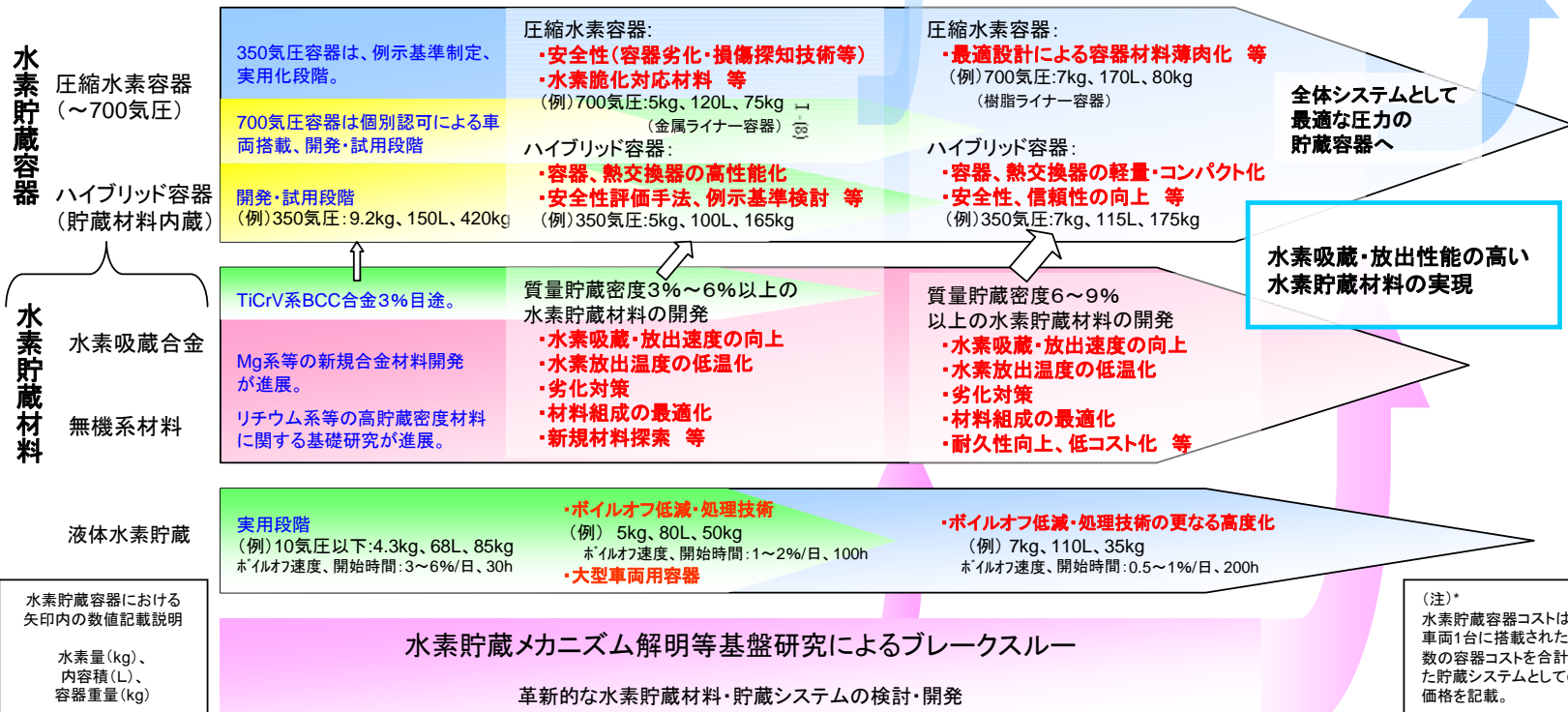
本事業は、水素貯蔵技術にブレークスルーをもたらす基礎的な研究開発を実施する事業である。また、これにより、水素貯蔵材料に関する世界トップレベルの我が国の技術力を、一層強化することも見通している。

国内研究機関を結集した緊密かつ柔軟なネットワークを基盤に集中的な研究開発を実施し、また、若手研究者、計算科学・放射光や中性子を初めとする分析科学などの異分野の研究者を積極的に登用し、さらに国外トップラボである米国ロスアラモス研究所との共同研究・連携により、水素貯蔵材料の構造解析等に「大強度陽子加速器（J-PARC）」や「Los Alamos Neutron Science Center: (LANSCE)」といった量子ビーム施設の相互活用やシミュレーション技術等を

補完することも含めて、強力な実施体制を構築して研究開発課題に取り組んでいる。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を高度化することを通して、材料科学・技術の進歩に対しても大きく貢献するものであり、J-PARCにおける中性子全散乱装置による高度な材料解析手法の構築を初めとする様々な研究成果については、その汎用性・応用性が極めて高いといえる。

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Ⅱ-(1) 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について

1. 事業の目標

本事業では、水素貯蔵材料の応用技術に必要な知見を得るための基礎研究を幅広い分野で行い、高性能かつ先端的水素貯蔵材料開発に必要な水素貯蔵に関する基本原理を解明するとともに、その成果を先端的材料開発の技術開発指針として産業界へ提供することによって、水素社会の真の実現に貢献する。

将来の燃料電池車の技術動向・市場動向を見通すと、官民を上げて燃料電池車の普及開始を目指す 2015 年以降の中長期的な視点においては、高圧水素貯蔵方式よりもコンパクトで効率的な水素貯蔵システムに対するニーズはより高まるものと想定される。そのため、それに応えうる実用特性を有する水素貯蔵材料が必要とされる。

本事業の具体的な目標設定にあたっては、貯蔵材料の実用特性値などについて材料開発的な数値目標等を設定するのではなく、それぞれの研究開発項目毎に得意とする基礎研究アプローチによって、水素貯蔵材料の実験・解析手法の高度化を通して基礎的知見を獲得し、開発指針を提供することに重点をおいた。

以上を踏まえて、本事業全体の研究開発目標と、研究開発項目毎の目標について、中間目標（平成 21 年度）、最終目標（平成 23 年度）を以下のように設定した。

【事業全体の研究開発の目標】

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。

【研究開発項目毎の研究開発の目標】

研究開発項目① 金属系水素貯蔵材料の基礎研究

中間目標：金属系水素貯蔵材料の構造解析を高度化し、水素吸蔵・放出反応特性の理解および反応機構の解明への道筋を見出す。

最終目標：金属系水素貯蔵材料の開発指針を提示する。

研究開発項目② 非金属系水素貯蔵材料の基礎研究

中間目標：ナノ複合水素貯蔵材料の反応機構解明のための指針を得るとともに、電子状態や構造安定性を解明する。

最終目標：非金属系水素貯蔵材料の開発指針を提示する。

研究開発項目③ 水素と材料の相互作用の実験的解明

中間目標：水素と材料との相互作用により出現する構造の変化などの研究から、水素貯蔵材料の開発指針作成の方向性を定めるための基礎知見を獲得する。

最終目標：高濃度水素化物の開発指針を提示する。

研究開発項目④ 計算科学による水素貯蔵材料の基盤研究

中間目標：種々の水素吸蔵材料について、電子密度分布、最安定な水素位置等を明らかにし、吸蔵特性等に寄与するミクロ構造等に関する指針を得る。

最終目標：計算科学的手法による開発指針を提示する。

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

中間目標：J-PARCにおける中性子全散乱装置の運用を開始し、中性子全散乱装置の性能を実証するとともに、水素位置情報の精密測定に用いる中性子制御デバイスの仕様を策定する。

最終目標：基盤技術としての中性子散乱法を確立する。

2. 事業の計画内容

2.1 研究開発の内容

【研究開発の実施期間】

本事業の研究開発の期間は、平成 19 年度から平成 23 年度までの 5 年間である。

【研究開発予算】

表Ⅱ-(1)に、研究開発項目毎の予算の推移を示す。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である。

		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
	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

【研究開発全体の計画内容】

本事業では、高性能かつ先端的水素貯蔵材料開発に必要な水素貯蔵に関する基本原理の解明、および材料の応用技術に必要な基盤研究を幅広い分野で横断的に行う。特に、材料と水素の相互作用・構造等の解明のため大型放射光施設(SPring-8)及び大強度陽子加速器(J-PARC)のような世界に誇る大規模量子ビーム施設を活用した極めて高度な解析技術を確立し、材料の個々の性質に即した水素貯蔵材料の基本原理の解明、計算科学等材料研究への応用技術の基礎を確立す

る。

研究開発の全体構成としては、以下の5つの研究開発項目を担当するグループが、プロジェクトリーダー(PL)のもと相互に連携しながら、総合的かつ一体的に事業を推進する。

- 研究開発項目① 金属系水素貯蔵材料の基礎研究・・・・・・・・・・金属系材料G
- 研究開発項目② 非金属系水素貯蔵材料の基礎研究・・・・・・・・・・非金属系材料G
- 研究開発項目③ 水素と材料の相互作用の実験的解明・・・・・・・・・・材料物性G
- 研究開発項目④ 計算科学による水素貯蔵材料の基盤研究・・・・・・・・・・計算科学G
- 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・・中性子G

図Ⅱ-(1)に、研究開発グループの相互関係について示す。プロジェクトを推進する上で、金属系Gと非金属系Gは、それぞれの保有する水素貯蔵材料に関する材料科学的基礎研究アプローチを活用するとともに、材料物性Gの保有する放射光による構造物性の研究アプローチ、中性子グループの構築する全散乱測定による研究アプローチ、ならびに計算科学グループの保有する材料の特性予測などの研究アプローチを相互補完的・融合的に活用して、プロジェクトの成果最大化を図る。

本事業の研究開発計画を、図Ⅱ-(2)に、プロジェクト全体のマスタープランとして示す。5つの研究グループは、それぞれの保有する研究アプローチによって、水素貯蔵材料の構造解析、貯蔵原理の基礎解明等を進めるにあたって、研究用試料や材料評価・計算結果の受け渡しによる相互補完・協力のみならず、研究手法そのものを共同構築することなどを通して、中間目標としての水素貯蔵材料の開発指針作成の方向性を定める。さらに、構築した研究手法をフルに活用して材料の評価・解析等を進め、最終目標としてのコンパクトで効率的な水素貯蔵材料の開発指針提供を目指す。

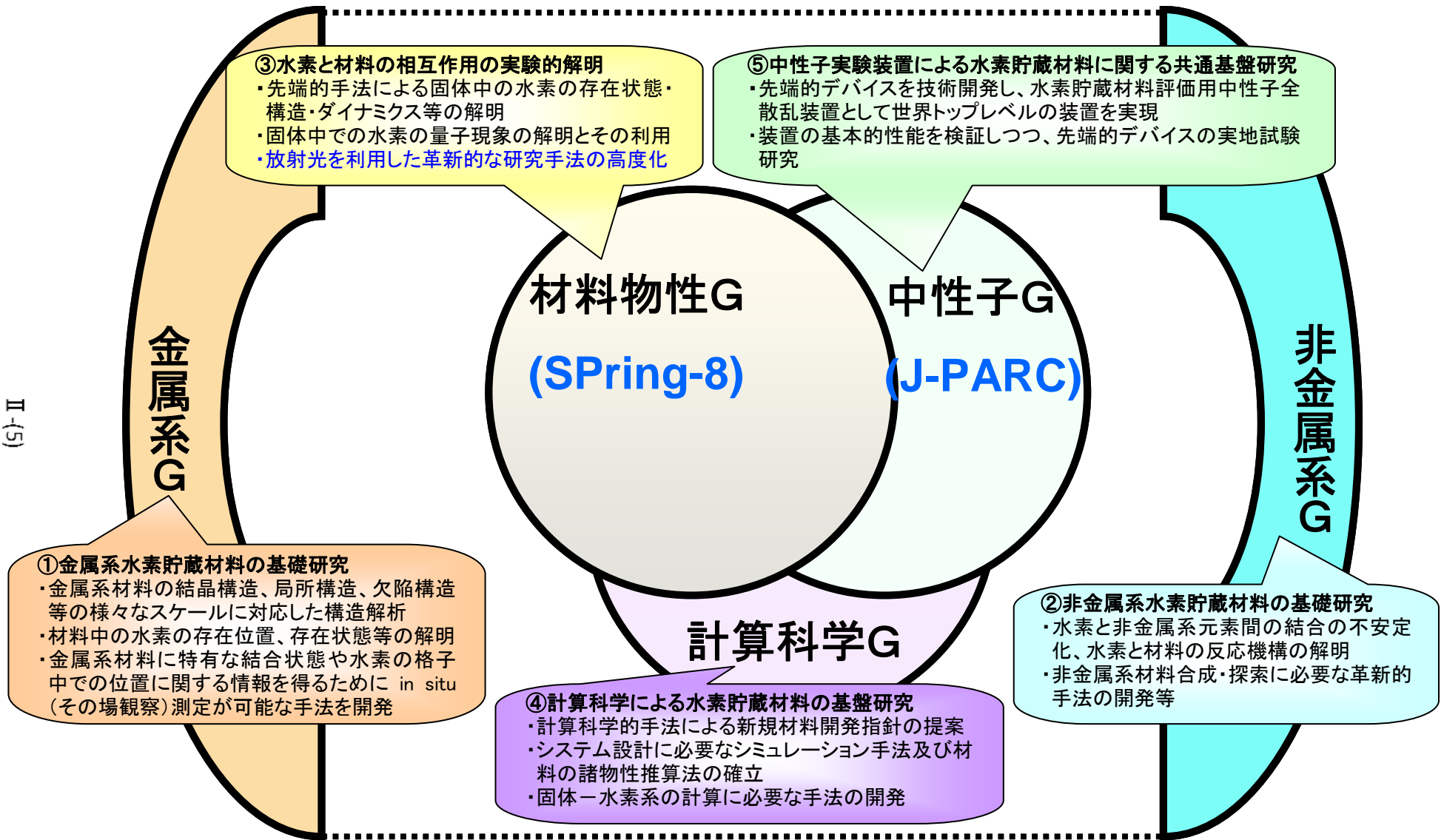


図 II-(1) 研究開発グループの相互関係

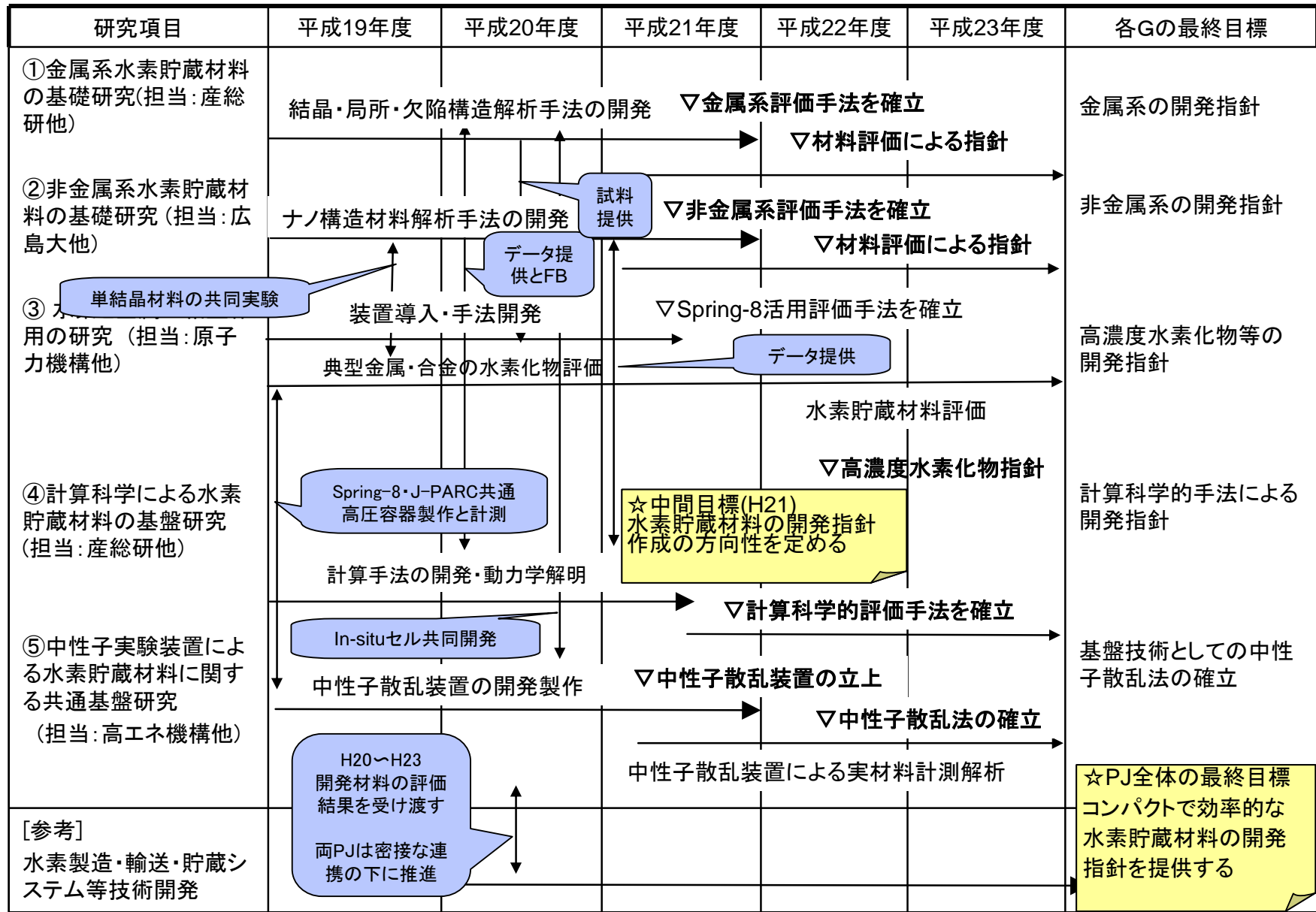


図 II-(2) プロジェクト全体の研究マスタープラン

【研究開発項目毎の計画内容】

2.1.1 「金属系水素貯蔵材料の基礎研究」

金属系材料を対象とした実験的アプローチによる基礎研究を行う。種々の高度な測定手法を駆使して、結晶構造、局所構造、欠陥構造等の様々なスケールに対応した構造を解析する。反応中の「その場観察法」によるキャラクタリゼーションの結果をもとに、水素吸蔵特性を考える上で重要な因子の特定、反応機構の解明等を進める。より詳細な情報を得るための測定および解析方法の高度化、中でもその場観察法、またはそれに準じたリアルな状態での測定を実現するための手法開発を併せて行う。

2.1.1.1 結晶構造および局所構造の解析（産業技術総合研究所 エネルギー技術研究部門）

X線回折法および中性子回折・散乱法により、水素吸蔵材料の結晶構造および局所構造を調べる。水素の情報を得るための限られた手法である中性子回折・散乱法を利用して、水素の位置を含めた結晶構造解析および水素原子周りの局所構造解析を進める。そのために、本事業において J-PARC 内に建設される中性子全散乱装置などを用いる。また、SPring-8 のグループとの協力により、高輝度 X 線を活用した精密回折測定および反応を追跡する時分割測定にも着手する。しかしながら、これら量子ビームを利用できる機会は限られているため、これを補完する手段として、実験室用としては最も高性能な X 線構造解析装置を導入し、合金試料および水素化物試料について、金属格子に関する詳細解析、および種々の水素化条件による構造変化の測定などを行う。

2.1.1.2 局所構造および水素の存在状態の解析

（産業技術総合研究所 エネルギー技術研究部門、計測フロンティア研究部門）

核磁気共鳴法(NMR)を用いて、水素の存在位置、存在状態等を調べる。水素(H, D)および金属元素の NMR を駆使し、X線・中性子を用いた構造解析を相補的に用いることにより、より詳細に局所構造および水素の存在状態を検討する。また、緩和時間等の測定により、金属中の水素の拡散挙動を調べる。水素雰囲気での測定が可能な試料セルの試作を行うとともに、金属水素化物に適した測定方法の探索、その場観察手法、またはそれに準じたリアルな状態での測定手法の開発等を行う。

2.1.1.3 欠陥構造・ナノ構造の解析(産業技術総合研究所 エネルギー技術研究部門)

金属系材料が水素を吸蔵する際に導入される転位や空孔などの格子欠陥の詳細、および欠陥生成のメカニズムについて、陽電子消滅測定、電子顕微鏡観察などの手法を用いて調べる。その結果に基づき、欠陥生成を考慮した水素化反応のメカニズム、欠陥生成が水素化特性に

及ぼす影響等について検討する。

2.1.1.4 水素貯蔵材料の研究動向および先端的測定手法に関する調査

(産業技術総合研究所 エネルギー技術研究部門、計測フロンティア研究部門)

水素貯蔵材料の海外における研究開発動向および本研究の推進に必要な不可欠な先端的測定手法に関する情報を得るために、米国、欧州等での海外調査を適宜実施する。

2.1.1.5 ロスアラモス国立研究所との共同研究

(産業技術総合研究所 エネルギー技術研究部門—再委託 米国ロスアラモス国立研究所)

水素貯蔵材料の革新的性能向上に必要な条件等を明らかにすることを目指し、産業技術総合研究所とロスアラモス国立研究所は、以下の2つの内容について国際共同研究を実施する。

- ・ロスアラモス国立研究所が保有する世界トップレベルの量子ビーム（中性子線）施設であるロスアラモス中性子科学センター（LANSCE）を活用し、水素貯蔵材料のための高度な構造解析手法の研究を行う。とくに、中性子粉末回折装置（NPDF）を用いた結晶構造・局所構造の解析手法を、当プロジェクトでの中性子実験装置による研究へ応用し、発展させることを目指す。

- ・ロスアラモス国立研究所が得意とする中性子回折に関するソフトウェア技術を活用し、本事業で建設する中性子散乱装置からのデータ取得とその解析に適宜反映させる。

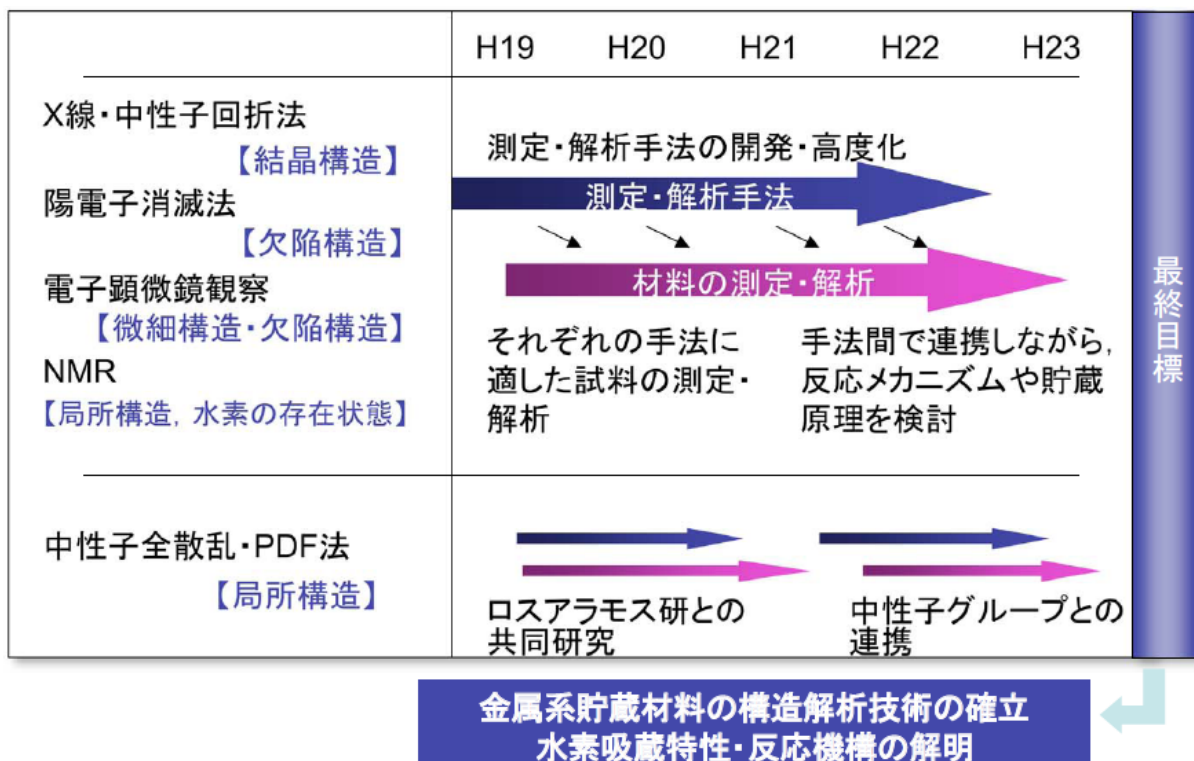
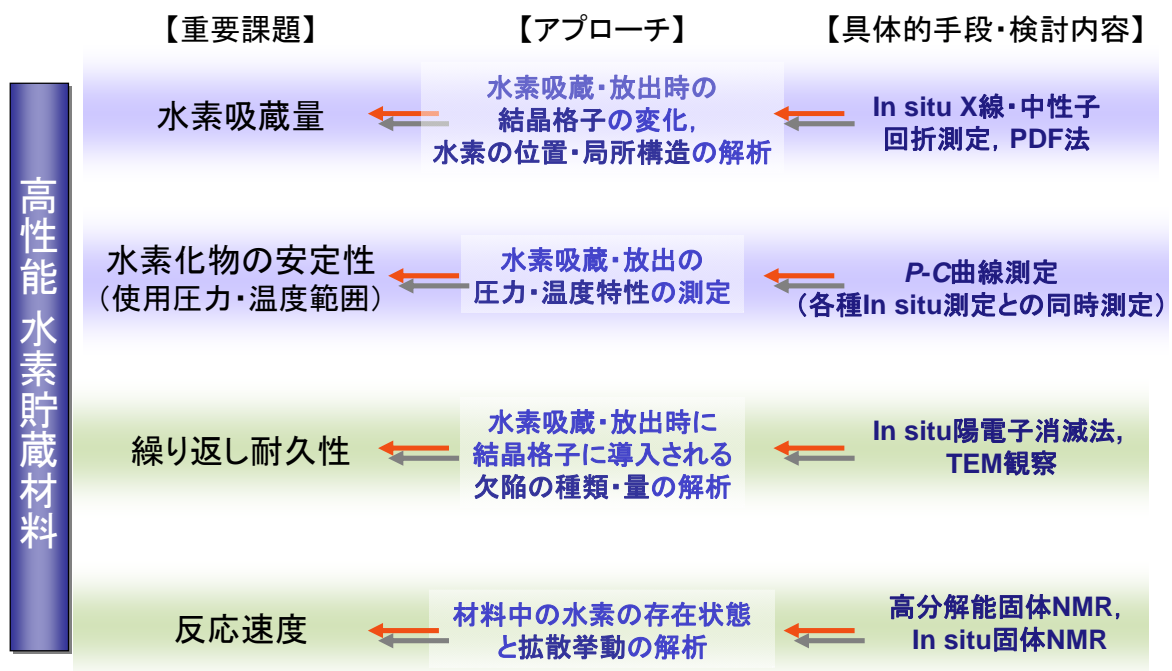


図 II-(3) ①「金属系水素貯蔵材料の基礎研究」の研究開発計画

2.1.2 「非金属系水素貯蔵材料の基礎研究」

軽元素系水素貯蔵材料(NaAlH_4 , MgH_2 , Li-Mg-N-H 等)の重量水素密度は水素吸蔵合金に比べ大きく、水素貯蔵タンク軽量化をはかることが可能である。しかし、これらの材料の水素吸蔵・放出速度、反応温度および水素貯蔵量は実用的な水素貯蔵材料として不十分である。燃料電池自動車には水素吸蔵・放出速度が速く、不安定(生成熱の絶対値が小)で、水素貯蔵量の多い材料が必要である。このような特性は従来の軽元素材料のみでは達成できず、触媒や複数の水素化物等のナノ複合化によって可能になるものと考えられている。ところが、ナノ複合水素貯蔵材料の研究は試行錯誤的に行われてきており、水素貯蔵機構を明らかにすることが高性能水素貯蔵材料開発には不可欠である。そこで、本研究開発では非金属系水素貯蔵材料(ナノ複合水素貯蔵材料)の反応機構を解明し、高性能水素貯蔵材料として応用するために必要な基盤技術の原理を確立する。

2.1.2.1 ナノ複合水素貯蔵材料の作製、解析とその場分析

(広島大学 先進機能物質研究センター)

広島大学の実験研究グループはナノ複合水素貯蔵材料を合成するための極限反応技術とその場(in situ)分析技術を確立する。その場分析技術を用いてナノ複合水素貯蔵材料の種々の吸蔵状態での形態変化、組織変化、構造変化、触媒の化学状態変化等を解析し、反応機構解明のための指針を得る。広島大学の理論グループは、第一原理手法により非金属系水素貯蔵材料(ナノ複合水素貯蔵材料)の動的挙動の解析、電子状態や構造安定性を解明する。

2.1.2.2 その場電子顕微鏡観察による反応機構解析

(北海道大学大学院工学研究科材料科学専攻機能材料学研究室)

透過電子顕微鏡を用い、Mg系、NaAl系等のナノ複合水素貯蔵材料を中心として加熱分解過程と水素化過程のその場観察と反応機構解明を目指す。

電子顕微鏡内で水素吸蔵材料の形成過程をその場観察するために、従来の環境セルに機能を付加した加熱型環境セルを作製し、表面活性な水素吸蔵材料の生成と分解の過程を電子顕微鏡内でその場観察するために、電子顕微鏡用試料を高度の不活性雰囲気内で装着が可能な不活性試料装着システムを開発、整備する。

また、室温から100℃程度の温度領域で実用され得る水素吸蔵材料の研究には室温以下の水素化挙動も重要であり、小型冷却循環装置の付随した冷却型環境セルを製作し、各種吸蔵材料の生成反応を解析する。

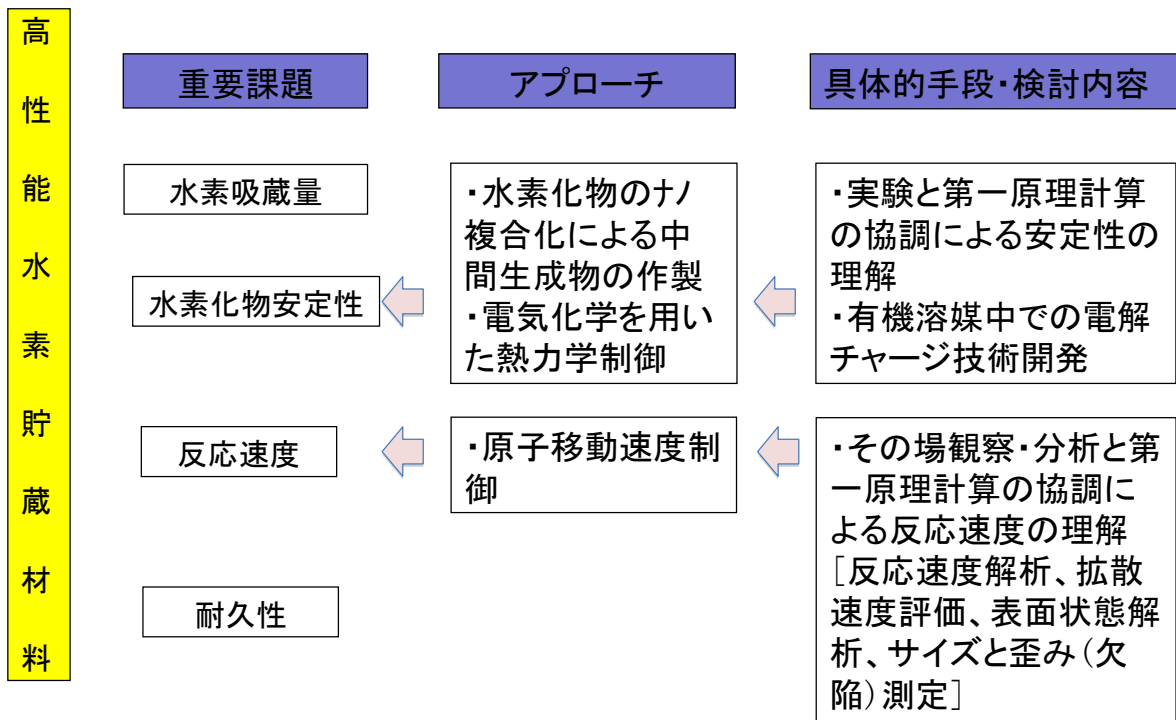
さらに、その場加熱実験による各種吸蔵材料の分解反応を解析すべく、触媒や複数の軽量水素化物をナノレベルで分散させたナノ複合材料に対して真空中の加熱分解過程を高分解能電子顕微鏡で観察し、水素化物の熱的安定性から反応機構の解明を目指す。

2.1.2.3 電解チャージによる非金属系水素貯蔵材料の創製と反応機構解析

(上智大学理工学部機能創造理工学科材料科学研究グループ)

電解水素チャージによる水素貯蔵材料創製技術を確立し、この手法によって、ナノ複合水素貯蔵材料の構造解析、水素吸蔵放出特性評価を行い、反応機構解明にせまる。また、材料を変形させることにより、格子欠陥密度を変え、水素吸蔵量や水素化物生成促進も試みる。

本研究項目では、軽元素に対して電解水素チャージ法を確立し、これによって水素貯蔵材料の創製に向けた基礎的知見を蓄積し、その反応機構解析を行う。電解水素チャージで合成した非金属系水素貯蔵材料はプロジェクト内で相互評価する。合成した非金属系水素貯蔵材料をグローブボックス中で取り扱うことにより、試料表面の酸化物を取り除いたり、表面形状を変化（表面粗さ計で評価）させて、反応速度を評価する。また、物理的手法（電解水素チャージや機械的変形）により反応速度と熱力学的安定性を変化させたナノ複合水素貯蔵材料の構造解析、水素吸蔵放出特性評価を行う。これらの研究を通して、非金属系水素貯蔵物質の反応速度と生成熱を制御する技術の基盤を作る。



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
北海道大学	加熱型環境中作製	不活性試料装着システム開発	冷却環境セル、超高圧電子顕微鏡用環境セルの作製		
	TEMによる各種吸蔵物質の生成反応、分解反応の解析				
広島大学	極限反応技術確立とナノ物質の作製				
	単結晶(バルク、薄膜)の作製				
上智大学	その場観察、分析、第一原理計算による動的挙動解析、電子状態と構造安定性解明				
	水溶液中での電解チャージによる試料作製				
	有機溶媒中での電解チャージによる試料作製				
	非金属系水素貯蔵物質の解析、水素吸蔵放出特性評価				

図Ⅱ-(4) ②「非金属系水素貯蔵材料の基礎研究」の研究開発計画

2.1.3 「水素と材料の相互作用の実験的解明」

水素と材料の相互作用の実験的解明のために、高密度水素化物の構造物性、水素貯蔵材料表面の化学的制御と材料特性の相関、水素貯蔵物質の局所電子状態と構造変化、水素貯蔵材料の電子物性、水素吸蔵合金の極限環境下における電子光物性および水素貯蔵材料におけるM-e-H間相互作用のNMR分光解析を行う。その際には、SPring-8に設置された各種の放射光利用分析機器を有効活用する。また、SPring-8に加えて、それぞれの物性測定に相応しい、先端的かつ独自性の高い計測装置を用いる。放射光（X線）と中性子は補完的な関係にあるので、中性子グループとの連携も進める。

2.1.3.1 高密度水素化物の構造物性研究（日本原子力研究開発機構）

水素化によって金属-絶縁体転移、構造相転移など特徴的な水素-金属相互作用を示す希土類金属Y等の2および3水素化物を対象に、水素-水素間距離の圧縮に伴う構造相転移の探索と転移機構の解明研究を行う。また、高圧下で著しい融点降下が報告されている遷移金属水素化物を対象に、高温高圧下で液体状態を実現し、液体中での金属原子の近距離及び中距離秩序を解析することにより、水素の高密度凝集構造と電子状態との関係を明らかにする。さらに、高温高密度水素流体を用いて、水素-水素間距離が2Åを下回る軽金属の高密度水素化物を合成し、結晶構造及び熱安定性などの基礎物性について研究する。

高圧下における金属格子の連続変形及び構造相転移に伴う水素位置の変化測定から水素-金属原子及び水素-水素相互作用を解明するために、放射光X線回折実験と合わせて、中性子グループと共同して中性子回折により水素原子位置を決定する実験を行い、高密度水素化物の精密構造解析を行う。また、水素化・脱水素化反応過程における構造変化を研究するため、金属系グループと協力して、放射光X線回折による水素化・脱水素化反応過程における構造変化を測定する。水素化・脱水素化過程を時分割測定することで、反応過程における結晶構造の変化を詳細に調べる。

2.1.3.2 水素貯蔵材料表面の化学的制御と材料特性の相関研究

2.1.3.2.1 表面変性層制御と水素脱離温度特性との相関研究（日本原子力研究開発機構）

水素貯蔵合金において水素は結晶中に貯蔵されるが、脱離や吸蔵は結晶表面を介して起こる。そのため、水素の脱離温度特性や吸蔵に関わる圧力、温度などの条件は表面皮膜の膜厚や膜質に大きく左右される。

そこで、水素貯蔵合金の水素脱離温度特性を評価するために、水素貯蔵合金の表面に存在する自然皮膜を真空中で取り去り、改めて酸化膜等の人工的な皮膜を形成する方法を開発し、合金毎に最適条件を見出す。それによって自然皮膜や人工皮膜を介した水素脱離温度特性の差異を評価する。

水素貯蔵合金の表面化学状態を評価するために、単色化した軟X線放射光を活用したX線光電子分光法を適用する。それによって自然皮膜および人工皮膜の構成元素の光電子スペクトルを測定し、その化学シフトを観測することによって他の構成元素との化学結合状態を評価する。一般にガスと材料との化学反応によって結晶の構造や電子状態が変化する。その時間変化を観測する研究は緒についたばかりである。特に水素が表面皮膜を介して材料結晶から脱離、あるいは、結晶中に吸蔵される過程の水素材料の結晶構造や電子状態変化についての研究例を学会での聴講により調査することで、エネルギー分散型 XAFS (DXAFS) システムを用いた水素貯蔵材料の時間分解構造解析および電子状態解析の指針を得る。

2.1.3.2.2 水素貯蔵材料の表面改質と軟 X 線分光による表面化学分析(兵庫県立大学)

水素貯蔵材料の貯蔵能は材料の表面物性に大きく依存する。大きく表面物性を変えることができるイオン照射や反応断面積の大きい軟X線放射光照射を用いて水素貯蔵材料の表面改質を行う。また表面物性を遷移金属の化学状態解析に有効な軟X線光電子分光および炭素原子の局所構造・化学状態解析に有用な吸収端近傍微細構造の測定から評価を行い、表面近傍の化学状態と水素吸蔵の関係を把握する。

2.1.3.2.3 水素化ダイヤモンドライクカーボンの表面処理と水素定量解析 (神戸大学)

水素化 DLC は原子数比で 40%を超える水素原子を膜内に貯蔵していることが知られており、材料内部に貯蔵された水素の放出特性、特に表面層の効果を研究するには適した材料である。そこで、水素化 DLC をモデル材料として、表面皮膜と水素放出特性・利用効率に関して調査することで、水素貯蔵材料の表面変性層制御に関する研究指針を得る。

2.1.3.2.4 水素貯蔵材料の反応における表面構造変化に関する研究 (大阪大学)

チタン(Ti)表面における水素の吸着構造や吸着量を原子レベルで調べ、水素貯蔵の初期吸着機構についての知見を得るため、水素貯蔵合金表面構造の解析システム製作の一環として、実空間構造を観察する走査型トンネル顕微鏡(STM)と表面層間距離を厳密測定できる低速電子回折装置(LEED)を組み合わせた独自の構造解析システムを製作する。また、昇温脱離スペクトル(TDS)を併用することにより水素の吸収・放出の動的挙動と構造変化を明らかにするシステムを構築する。これらの実験システムを活用して、水素の挙動と表面構造変化を評価し、水素貯蔵合金設計のための指針を追究する。

2.1.3.3 水素貯蔵物質の局所電子状態と構造変化の研究

2.1.3.3.1 水素貯蔵物質の局所電子・振動状態の研究 (日本原子力研究開発機構)

水素貯蔵材料の高圧下磁気特性評価および複数元素に対するメスバウアー分光法の開発を

行い、水素貯蔵物質について、メスバウアー分光（核共鳴散乱）測定を用いて、水素を貯蔵する宿主物質（原子）と水素との相互作用が局所的電子状態（および磁気状態）に及ぼす影響や、それと高圧環境下での宿主物質の状態変化との関連性を明らかにする。また、核共鳴非弾性散乱法を用いて、高い振動数で局所的な振動を行っていると考えられる水素と結合している宿主原子の振動状態の測定も行う。これらの結果に基づいて、水素との結合による状態変化についての基礎物性的知見を得る。

2.1.3.3.2 水素貯蔵物質の精密結晶構造の研究（高輝度光科学研究センター）

金属水素化物に対して高圧・低温下でのX線回折実験と実施するためにダイヤモンドアンビルセル(DAC)を収納可能なクライオスタットを利用する。同クライオスタットを搭載するために、高耐荷重型ゴニオステージを導入し、低温・高圧X線回折実験と放射光メスバウアー分光測定で利用する。また、DACを使用した超高压下でのX線回折またはメスバウアー分光（核共鳴散乱）を行う際の高密度X線ビームを発生させるために、光硬化性樹脂製-X線屈折レンズを使用したX線集光光学系及びX線コリメーターを開発し、水素貯蔵物質の精密結晶構造を高精度、かつ効率良く測定する。金属水素化物に対して多重極限・複合物性測定が可能なクライオスタット搭載用DACを開発する。これらの一連の装置・手法開発を通じて、金属水素化物に関する精密構造解析と磁気構造解析の研究を実施する。

2.1.3.4 水素貯蔵材料の電子物性の研究

2.1.3.4.1 硬X線分光を用いた水素化物の電子・磁気状態の研究（広島大学 理学研究科）

高濃度水素化物である希土類水素化物と、反対に水素化が困難な遷移金属水素化物において、水素と金属との相互作用によって引き起こされる電子・磁気状態変化およびその相違を、硬X線分光法を用いて解明する。得られた知見から、これらの物質の中間に水素化の安定性を有する水素貯蔵材料開発への指針を得る。

希土類水素化物の希土類L吸収端XAS測定を行い、水素による電荷移動の有無や価数（水素がアニオンかカチオンかの評価）など、水素-金属間の結合様式を明らかにする。

金属水素化物では水素化によって格子の膨張や構造相転移が生じる。XMCDの特長である元素選択性と電子殻選択性を活用すると、金属水素化物の磁気状態に関する知見が得られる。本研究では代表的な強磁性体である遷移金属（Fe、Co、Ni）の高圧水素化物や希土類金属2水素化物の磁気状態をXMCDから調べる。

電子状態のプローブとしての発光分光を用いて、エネルギー分解能が高い吸収スペクトルが取得し、希土類水素化物の電子状態の精密決定を行なう。

2.1.3.4.2 放射光分光法による電子構造と磁性の研究（日本原子力研究開発機構）

水素化物の電子構造を精密測定するために、希土類や合金等の水素化物に対し、内殻吸収分光測定を行い、スペクトル形状や結合エネルギーの変化から、水素化による母体元素の価数変化や水素原子との電荷移動方向を調べる。さらに、光電子分光法を適用し、価電子帯の電子構造に関する詳しい情報を得る。単結晶試料に対しては、角度分解光電子分光を行い、バンド分散・フェルミ面形状を実験的に決定する。

水素化物の元素選択的磁気状態を精密測定するために、特に強磁性を示す水素化物に対して、大型放射光施設 SPring-8 の BL23SU において、軟 X 線吸収磁気円二色性(MCD)測定を行い、元素及び電子軌道を選択的に調べる事により、磁性の内部構造の磁場及び温度依存性の詳細を知る。

上記測定で得られた状態密度、バンド分散及びフェルミ面等の結果に対し、水素化物電子構造計算装置を用いたバンド理論による第一原理計算やモデル計算による解析を行い、水素化物の電子構造に関する理論的な解釈を与える。放射光電子分光測定により金属水素化物の電子構造および磁気構造を決定する。放射光電子分光法で得られた実験結果とバンド理論計算の結果との相互比較から、水素-金属結合の軌道依存性と電子・磁性物性を決定する支配因子に関する知見を得る。

2.1.3.5 水素吸蔵合金の極限環境下における電子光物性の研究

2.1.3.5.1 水素吸蔵合金の超高压環境下の電氣的・磁氣的的研究（大阪大学）

低温式水素流体充填装置の製作・導入し、超高压環境下における研究手法の充実を図る。また、水素充填中の発生圧力のその場測定が正確な吸蔵圧力条件の設定や測定には欠かせないため、ファイバー式ルビー蛍光測定装置を導入する。液化水素流体を水素吸蔵合金に圧力をかける際の圧力媒体としても機能させる。これらの取り組みによって、水素吸蔵の過程における電気伝導率や光学特性などの物性変化が、より高精度で観測できる強力な研究ツールとなるので、金属-絶縁体転移や圧力下での再金属転移の過程を解明に活用する。

希土類水素化物の高圧下電気伝導を評価する。水素吸蔵に伴って金属-絶縁体転移が起こるが、さらに圧力を印可することで絶縁体-金属転移が起こるとされている。温度、磁場、静水圧性条件を変化させてそれらの転移機構を調査し、金属-絶縁体転移や圧力下での再金属転移のメカニズムを総合的に明らかにする。

2.1.3.5.2 高圧力下の光スペクトロスコープによる金属水素化物の光電子物性の研究（岐阜大学）

ラマン散乱による振動分光測定、及び可視紫外光の吸収分光測定を用いて、代表的な金属水素化物である MH3 や MH2 における、水素と金属材料 (M) の振動状態の直接観測によるそれぞれの位置 (構造) と動き、および、エネルギーバンド等の電子状態に関する情報を得る。圧力誘起の構造相転移や金属化転移現象を研究し、水素と材料の相互作用を解明する。

2.1.3.6 水素貯蔵材料における M-e-H 間相互作用の NMR 分光解析

(東北大学大学院工学研究科)

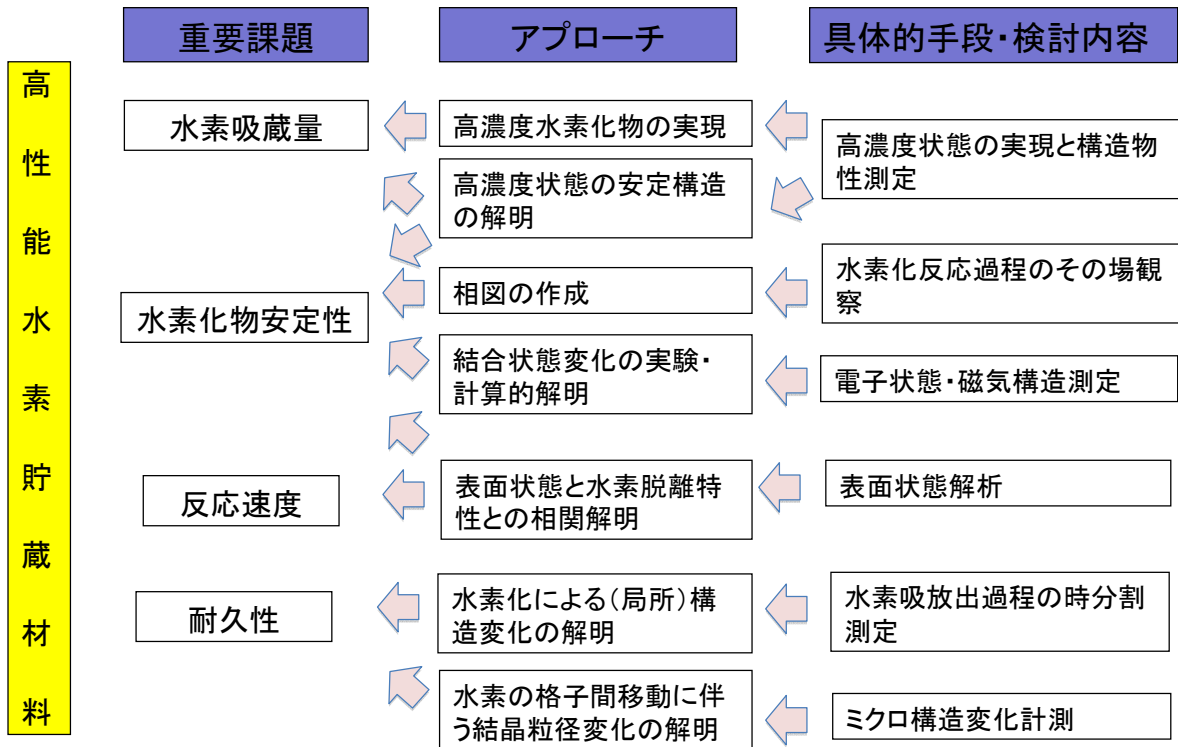
水素貯蔵材料に特化した高温・雰囲気制御 NMR プローブの開発を行う。既存の高温プローブには検出コイル周りにテフロンやプロトンを含有する接着材が用いられており、スペクトルにこれらがプロトンのバックグラウンドを与える。そこで、プロトンフリーな材料で構成され、かつ、水素吸放出を *in situ* 観測できるプローブを開発する。

NMR 及び電子状態計算に供する試料は、YH₃ 等の H/M=3 の配位をとれる水素化物、高压合成で得られる Mg 基水素化物、BCC 系材料、Li 系水素貯蔵材料である。水素貯蔵材料の NMR による評価・解析法の条件を検討し、材料の化学シフトや緩和時間を測定結果から、NMR の観点から水素の存在状態についての知見を得る。

また、NMR の測定結果との対応をとるために、NMR 測定に供する試料の電子状態計算を行う。その結果からフォノン解析、有効電荷の計算も実施する。

さらに、NMR 分光と電子状態計算から得られる知見（シフト量、緩和時間、有効電荷等）と水素吸放出特性（平衡圧や放出温度）の相関図を作成する。

本事業における最終目標へのアプローチの手法



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	各担当の最終目標
①高密度水素化物の結晶構造と物性の相関研究 (担当：JAEA)			▽放射光・中性子を利用した高密度構造を解明			高密度状態における水素-水素、水素-金属間相互作用に関する知見を得る。
②水素貯蔵材料表面の化学的制御(酸化・表面改質)と材料の水素吸蔵放出特性の相関研究 (担当：JAEA, 兵庫県大, 神戸大, 阪大)		高密度構造の知見を適宜受け渡す。	▽放射光等を利用した表面状態測定法と時分割測定法の開発	極限環境下の構造の知見を適宜受け渡す。		表面状態が水素吸蔵放出特性に与える影響の知見を得る。
③水素貯蔵物質の局所電子状態と構造変化の研究 (担当：JAEA, JASRI)		電子状態の知見を適宜受け渡す。	▽放射光を利用した多重極限下局所構造測定法の開発	磁気構造の知見を適宜受け渡す。		水素と金属の相互作用によって受ける局所的な構造・電子状態に関する知見を得る。
④水素貯蔵材料の電子物性の研究 (担当：広島大, JAEA)			▽放射光を利用した電子・磁気状態精密測定法の開発			水素と金属の結合状態と物性との相関に関する知見を得る。
⑤水素吸蔵合金の極限環境下(高圧・低温)における電子光物性(電気抵抗、光学特性など)の研究 (担当：阪大, 岐阜大)		高密度状態の物性の知見を適宜受け渡す。	▽高密度状態の電気伝導・光学特性等の解明			高密度状態における電子状態・振動状態に関する知見を得る。
⑥水素貯蔵材料におけるM-e-H間相互作用のNMR分光解析 (担当：東北大)		合成試料の構造評価を適宜行う。	▽プロトンフリーなNMRプローブの開発			化学シフト、緩和時間等と水素吸蔵放出特性との相関に関する知見を得る。
						【中間目標】(H21) 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
						【G全体の最終目標】 高濃度水素化物の開発指針を提示

図 II-(5) ③「水素と材料の相互作用の実験的解明」の研究開発計画

2.1.4 「計算科学による水素貯蔵材料の基盤研究」

計算科学的アプローチによる水素貯蔵材料の構造や特性に関する研究を行う。まず、第一原理計算を用いて、種々の水素貯蔵系における最安定水素位置、電子密度分布、電子構造、水素吸蔵過程のダイナミクス解析等を行う。一方、より大規模な空間・時間スケールの現象を扱える古典分子動力学法を用い、貯蔵材料内での水素の拡散と格子欠陥との相互作用、多元系結晶の構造安定性と組成依存性等について解析する。また、新しい水素吸蔵材料として着目されているマイクロ孔金属錯体物質(MOM)とクラスレートハイドレート为例として、探索用高度第一原理計算をメインとした計算手法の確立により、様々な条件に対応できる水素貯蔵材料の候補とその構造的特徴を明らかにする。

2.1.4.1 第一原理計算に基づく水素貯蔵材料の特性評価に関する研究

(産業技術総合研究所 計算科学研究部門)

量子力学に基づいた電子状態の第一原理計算では、系を構成する原子とその配置が分かっている場合には、そのポテンシャルエネルギーを、経験的パラメータを用いることなく、求めることが原理的に可能である。本研究では、プロジェクト内の実験結果との対比を念頭に、種々の水素貯蔵系について最安定な水素位置、電子密度分布、電子構造の決定等を試みる。また、水素貯蔵系で重要となる物性データ計算の新しい手法の開発を行う。

第一原理分子動力学シミュレーションによる水素吸蔵過程のダイナミクス解析は計算機速度の制約のために難しい課題となっている。水素分子の吸着、原子解離、拡散、結晶の相変態といった過程の中で、比較的高速の素過程は大規模並列計算、オーダーN法の利用等、低速の活性化素過程は活性化エネルギーの推算手法の開発等によって解析を試みる。計算にはこれらの目的に適したコードである OpenMX 及び QMAS を用い、コード開発者から水素吸蔵系に適用するための助言を得ながら解析を進める。

これらの計算・解析環境として原子構造データをインプットし、そこから様々な物性データを推算して実験データとの比較を行う「第一原理計算解析システム」の開発とその動作実証を行う。グラフィックを用いたプリ・ポスト・プログラムを開発し、関連実験分野の研究者が使いやすいように整備する。

2.1.4.2 水素貯蔵メカニズムに関する分子動力学的研究

(産業技術総合研究所 計算科学研究部門)

古典分子動力学計算は原子間の相互作用に簡略化されたモデル関数を用いることにより、第一原理計算では実現不可能な大きな空間・時間スケールの現象を追跡することができる手法で、温度等の条件を変えての計算も容易である。しかし相互作用の簡略化により絶対精度が犠牲になっているため、定性的な議論、特に材料特性発現メカニズムの解明等への利用が

有効である。本研究では水素貯蔵プロセスに関連するテーマとして、貯蔵材料内での水素の拡散や偏析、水素脆化、細粒化、粒界組織形成などのメカニズムを、原子スケールから追跡する。研究手法としては産総研で開発された構造モデリング・ツール GBstudio/GRcut と組織解析用プログラムをベースに、既存の汎用可視化ソフトウェアの利用に関する外部協力者の助言も得ながら、水素貯蔵材料に対応したプログラムを新たに開発・整備して用いる。欠陥構造中の水素位置把握のために分子模型も活用する。計算は小規模クラスタ計算機を導入して行う。これにより、材料内での水素の拡散、貯蔵、放出をはじめとする素過程、および材料全体の脆化や微細化に関するメカニズムを解明する。

2.1.4.3 水素貯蔵材料の構造安定性に関する分子動力学的研究（物質・材料研究機構）

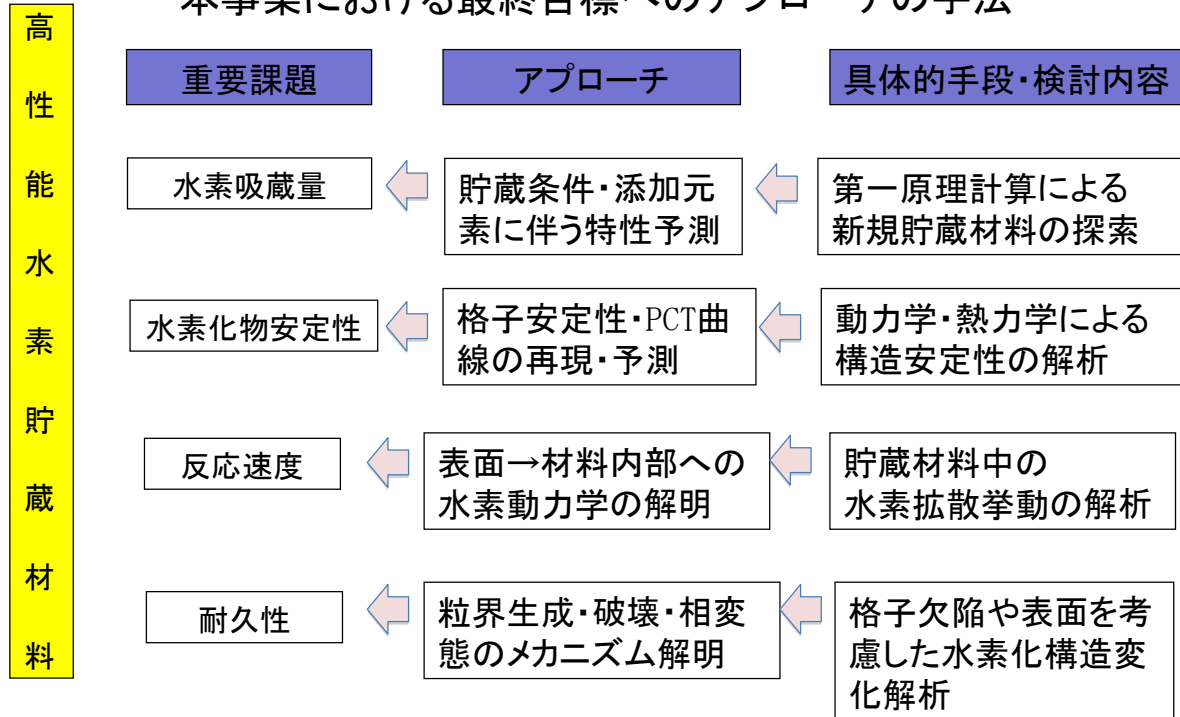
水素貯蔵材料の性能向上を図る上で、水素貯蔵状態での金属間化合物の構造安定性を理解することは重要である。そのためには静的なエネルギー論のみならず、動力学的な考察が必要となる。そこで、静的な量子力学計算のみならず、動的な分子動力学計算を駆使して、構造安定性に関する研究を行う。また材料の構造安定性のみならず、貯蔵された水素の静的・動的安定性も検討し、水素貯蔵特性と材料安定性、およびそれらのメカニズムを明らかにする。更に水素貯蔵量を増大させるために、水素圧力-組成等温線（PCT 曲線）の理論計算手法を確立する。統計熱力学モデルを用いて PCT 曲線を再現し、プラトー領域を支配するパラメータを導入する。この現象論的パラメータの原子論的意味を、第一原理法および古典分子動力学法により解明し、水素量を制御するための知見を得る。手法としては第一原理計算による水素安定サイトにおけるエネルギー計算および物質・材料研究機構で開発された分子動力学コードによる動力学計算を行う。本研究により、多元系における貯蔵材料の構造安定性・水素拡散・貯蔵量制御のメカニズムに関する基礎理解を確立し、材料開発への指針を得る。

2.1.4.4 新規水素貯蔵材料のシミュレーション探索研究（東北大学 金属材料研究所）

東北大学で開発されている混合基底第一原理計算コード TOMBO を用いて第一原理計算を行う。このコードは水素、炭素をはじめとした軽元素の計算を得意としており、水素吸蔵材料への適用とともに継続的にプログラム開発も行う。クラスレートハイドレートの系においては、特に重要となる水素分子と水の相互作用を高度第一原理計算手法による詳細解析をすすめる。さらに第一原理計算と格子力学を組み合わせた計算手法により熱力学的安定性を議論し、広範囲の圧力・温度領域におけるクラスレートハイドレートの相図を求め、高吸蔵量を実現する材料を探索する。ミクロ孔金属錯体物質(MOM)においてはホスト構造、リンカー元素による水素吸着能力、熱力学的安定性への影響を第一原理計算により明らかにする。計算は同大学情報シナジーセンターおよび金属材料研究所に新規導入されたスーパーコンピュータを用いて行う。またMOMの計算法や精度、クラスハイドレートの実験データや構

造安定性に関して、外部有識者の助言を得ながら研究を進める。これにより、様々な条件に対応できる水素貯蔵材料の候補とその構造的特徴を明らかにする。

本事業における最終目標へのアプローチの手法



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	最終目標
①特性評価 (産総研)		水素拡散に対する有効性を確認 手法開発・触媒効果の解析		マルチサイト・温度圧力依存性 特性評価結果		基本吸蔵特性の定量評価・予測技術の確立
②メカニズム (産総研)		水素吸蔵サイトの測定結果 計算手法の確立	現実系との対応を確認 格子欠陥と水素貯蔵の動力学	特性変化メカニズムの情報		格子欠陥と水素吸蔵の相互作用機構の解明
③構造安定性 (物材機構)		実験データの再現 構造安定性・吸蔵放出の動力学		放出温度の評価 水素放出温度		安定水素貯蔵の組成・温度領域評価法の確立
④新規材料探索 (東北大)		MOM、クラスレートへの適用	実験結果との比較 特性向上情報の提供	他の貯蔵材料への適用		新規貯蔵材料の特性向上指針の提案
実験系グループ		構造測定データ (随時全テーマへ)				

【中間目標】(H21)

- ・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

【G全体の最終目標】

計算科学的手法による開発指針を提示

図Ⅱ-(6) ④「計算科学による水素貯蔵材料の基盤研究」

2.1.5 「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」

水素貯蔵材料の種類は、従来から知られている合金系材料（水素吸蔵合金）に加えて、無機材料、炭素系材料、酸化物系材料などへとバラエティーが増しているのが現状である。また、その性状もナノ材料や非晶質などの従来の結晶の概念では整理できないものへと拡大している。「中性子全散乱装置」は、ブラッグ反射に加えて散漫散乱も併せて測定でき、両者を使って解析することでナノ材料や非晶質の水素貯蔵材料中の水素の位置を正確に求める事ができる。もちろん、ブラッグ反射のみを用いて結晶性の高い水素貯蔵材料の詳細な構造を解析することも可能であり、水素貯蔵材料に関連する構造的基礎研究において重要な装置と位置づけられる。本研究で建設する中性子全散乱装置の特徴は、最隣接原子間相関から数十ナノメートル程度までの幅広い距離相関を一挙に観測でき、かつ短時間で測定可能ということであり、世界的にも類の無い装置となる。上記 2.1.1～2.1.4 に共通する基盤研究テーマとして、水素貯蔵材料の構造研究に加え、原子レベルでの構造ひずみ解析及び秩序—無秩序転移の観測、原子拡散メカニズム、イオン伝導メカニズム、多様な環境下での水素結合反応の構造解析等を行う。

先端的デバイスの技術開発を行い、水素貯蔵材料評価用中性子全散乱装置として世界トップレベルの装置の実現を図る。

平成 19 年度には中性子検出器システムの開発を行いながら、生体遮蔽体等の製作を開始し平成 21 年度前半までには総有効検出面積の 1/2 程度の中性子検出器を製作及び設置し、平成 22 年度より水素貯蔵材料の in situ 実験（水素圧力は最大 10MPa、試料温度範囲は-220℃～200℃で制御可能）を実施する。平成 21 年度末までには、装置の基本的性能の検証を中心に行いながら、先端的デバイスの実地試験研究を進める。

また、機器全般の設計及び装置建設に際しては、全散乱装置を使った研究のエキスパートである再委託先研究者と密接連携しながら進める。

2.1.5.1 中性子検出器システムの開発（高エネルギー加速器研究機構）

高性能中性子検出器システムを開発し、性能を検証するために、測定時間をより短くし、かつ精度の高いデータを得るための検出器および検出器エレクトロニクスの開発を行う。中性子検出器システムの回路開発と基本試験を行い、その結果に基づいて、一次元位置敏感型ヘリウム中性子検出器システム製作する。また、中性子を使用せずに回路の特性を調べるためのヘリウム検出器調整回路を開発し、中性子ビームを使った補正時間を短縮する。さらに、ヘリウムガス中性子検出器システムよりも一桁以上高い計数率（200KHz 以上）を有する GEM(Gas Electron Multiplier)型中性子検出器システムの開発・試作を進め、入射中性子モニターとして実用化する。実地試験結果やモニター検出器の性能を評価しながら、改良を重ねて、

21 年度以降に最終版を製作、設置をする。

経時変化測定用回路を開発する。J-PARC の中性子源では、40 ミリ秒毎に中性子がパルス状に発生する。パルス毎に発生した中性子を識別する回路系を中性子検出器システムに組み込むことで、ミリ秒単位での経時変化測定が可能である。水素吸蔵、放出過程における材料内での水素位置の情報を、ミリ秒単位で観測するための基盤技術開発を行う。J-PARC における大強度中性子源を用いることで初めて可能になる実験である。こうした実験のため、21 年度までに、パルス中性子発生タイミングと試料環境制御（水素圧、温度など）を関連づける回路の中性子検出器システムへの組み込み方法を検討し、平成 22 年度以降に、性能を検証、実験に供する。

2.1.5.2 中性子ビーム制御デバイスの研究開発（高エネルギー加速器研究機構）

中性子ビーム整形機器として、中性子ビームのサイズを決定する機器（コリメーター、スリットなど）、波長範囲を決定する機器（ディスクチョッパー、T0 チョッパーなど）等、試料に照射される中性子ビームが実験に最適になるように整形する機器、高エネルギー中性子によるバックグラウンドを低減するための機器等を製作する。

水素位置情報の精密解析手法を確立するために、以下の研究開発を行う。中性子による軽水素原子（ 1H ）の構造観測において、非干渉性散乱と呼ばれる原子の構造情報を含まない散乱がバックグラウンドとなるため、構造観測の精度を向上させるためには適切な補正が必要となる。現状では、経験式による補正が行われているが、定量的な信頼性は低いのが現状である。非干渉性散乱を補正する方法として偏極中性子を用いる手法がある。中性子全散乱装置での偏極中性子の利用は世界に先駆けたものとなる。さらに試料中の水素の核スピンを偏極させることができれば、偏極中性子を利用して、水素の周辺環境に応じて水素位置情報を選択的に取得することが原理的に可能である。偏極中性子を利用するためには、これまでに開発されている中性子偏極フィルター等の中性子偏極・検極デバイスを全散乱装置に最適化する開発が不可欠であり、偏極中性子による水素位置情報の精密測定実用化のための初段的な開発に取り組む。中性子散乱理論を踏まえた実験方法の再検討を行いながら、平成 21 年度に中性子偏極・検極デバイスの仕様を策定する。

2.1.5.3 全散乱装置の研究開発（高エネルギー加速器研究機構）

全散乱装置の研究開発にあたっては、利用研究のエキスパートである再委託先研究者と密接連携しつつ、以下の分担で進める。

「中性子検出器配置の最適化設計」（再委託：京都大学原子炉実験所）

「全散乱装置真空槽の開発」（高エネルギー加速器研究機構）

「全散乱装置の性能評価」(高エネルギー加速器研究機構)

「PDF 解析法による結晶性水素貯蔵材料の構造解析による全散乱装置性能の実証」

(再委託：日本原子力研究開発機構)

「PDF 解析法によるナノ構造体またはバルク結晶材料の構造解析による全散乱装置性能の

実証」(再委託：日本原子力研究開発機構)

「水素貯蔵非晶質金属、水素貯蔵ナノ複合材料の構造解析による全散乱装置性能の実証」

(再委託：京都大学原子炉実験所)

「イオン伝導物質をモデル物質に用いた構造解析による全散乱装置性能の実証」

(高エネルギー加速器研究機構)

「酸化物ガラスをモデル物質に用いた構造解析による全散乱装置性能の実証」

(再委託：日本原子力研究開発機構)

「有機溶液および水溶液中の水素位置の構造解析による全散乱装置性能の実証」

(再委託：山形大学)

「大量の水素を含む生体分子をモデル物質に、それに特有な水和構造解析による全散乱装置

性能の実証」(再委託：福岡大学)

「金属ガラス、単純金属液体等のガラス状態あるいは液体状態の金属をモデル物質に用いた

構造解析による全散乱装置性能の実証」(再委託：九州大学)

「液体金属、半導体金属等のモデル物質を用いた構造解析による全散乱装置性能の実証」

(再委託：新潟大学)

2.1.5.4 放射線安全設備の開発 (高エネルギー加速器研究機構)

中性子線という放射線を安全に利用するための、生体遮蔽体やインターロック等の安全設備を 20 年度の前半までに完成させる予定である。生体遮蔽については、19 年度に設計を開始し全体の 2/3 を同年度内に製作・設置し、残りの 1/3 を 20 年度前半までに製作・設置する。インターロックについては、20 年度に設置を完了する。再委託先の日本原子力研究開発機構と密接に連携し、設計、建設を進める。

2.1.5.5 装置制御・データ解析ソフトウェアの研究開発 (高エネルギー加速器研究機構)

<装置制御ソフトウェアシステム開発>

高性能検出器システムや経時変化測定を始めとするハードウェアの制御は高度な操作が要求されるため、計算機ソフトウェアシステムの成否は、装置性能を決定する大きな要因である。従って、根幹となる装置制御ソフトウェアは J-PARC 物質生命科学実験施設で開発された汎用ソフトウェアを利用することとし、19 年度に全散乱装置の中性子検出器システムを制御するソフトウェアを整備し、20 年度に開始する中性子散乱実験に供する。その実験におい

て判明した問題点や経時変化測定を始めとする本装置の実験に特化した機能について 21 年度にソフトウェアに修正・改造を加えて、完成させる。

<データ解析ソフトウェアシステム開発>

本装置の測定データ量は数十ギガバイトから数百ギガバイトに達すると予想され、大規模データの高速処理が可能なデータ処理ソフトを開発する必要がある。さらに、より精度が高く処理速度の速いデータ解析ソフト、複雑な構造変化を可視化するためのソフトウェア等に関して動向調査を行い、20 年度よりデータ解析ソフトウェアを開発する。下記の項目を各研究機関が分担して実施する。なお、データ解析ソフトウェアについては、これまでのグループ員の豊富な経験・ソフトウェア資産をベースに自作する予定である。下記の項目を各研究機関が分担して実施する。

「全散乱装置による結晶水素貯蔵合金の詳細構造解析のため、J-PARC 全散乱装置に特化した 2 体分布関数のモデル計算プログラムの開発」(再委託：京都大学原子炉実験所)

「PDF 解析法とリートベルト解析法の特徴を使った解析システムの構築」

(再委託：京都大学原子炉実験所)

「水素貯蔵ナノ結晶材料の PDF 解析法の開発」(再委託：京都大学原子炉実験所)

「PDF 解析法を用いたナノ構造体またはバルク結晶材料の構造解析法の開発」

(再委託：日本原子力研究開発機構)

「モンテカルロ法を用いた構造シミュレーション (リバースモンテカルロ法) のガラス物質への適用」(再委託：九州大学)

「モンテカルロ法を用いた構造シミュレーション (リバースモンテカルロ法) の液体物質への適用」(再委託：新潟大学)

「経験的ポテンシャルを用いた構造シミュレーション (EPSR 法) の水素系物質への適用」

(再委託：福岡大学)

「同位体置換を用いた精密構造解析法の水素系物質への適用」(再委託：山形大学)

2.1.5.6 水素貯蔵材料の構造研究 (高エネルギー加速器研究機構)

水素貯蔵材料の構造や水素を吸蔵放出する反応に伴う構造変化を調べるための試料周辺機器 (水素雰囲気制御型試料セル並びに試料温度調節機器等) の開発を 21 年度に行う。中性子全散乱装置に特化した設計を行い、22 年度における水素雰囲気での *in situ* 実験に資する。また□「水素と材料の相互作用の実験的解明」により製作された高圧発生装置の予備実験を 21 年度に実施する。また、5-1-2.の経時変化測定用回路と組み合わせた実験のための開発も合わせて行い、平成 22 年度以降の経時変化測定に資する。

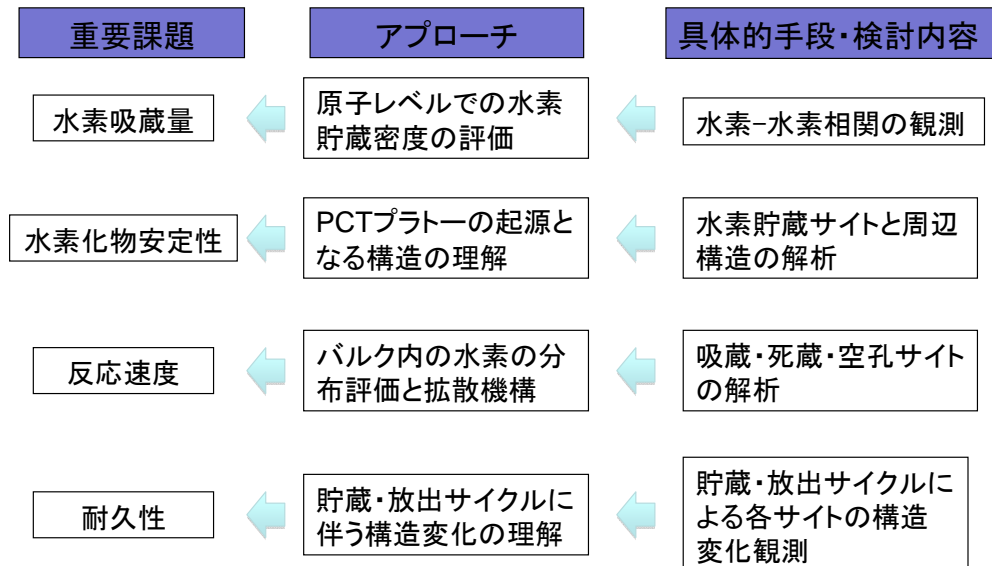
2.1.5.7 水素貯蔵材料のPDF解析

(高エネルギー加速器研究機構-共同実施 ロスアラモス国立研究所)

中性子散乱実験によって、無機系水素化物等の水素の放出・貯蔵に伴う構造変化を観測するため高温炉を整備する。複雑な構造を有する無機系水素化物等を対象に、J-PARC 中性子全散乱装置により構造変化の概要を観測し、ロスアラモス国立研究所に設置されている高空間分解能中性子全散乱装置を用いて精密な構造解析を行うため、必要な実験環境を整備する。

また、結晶PDF解析での実績を有するロスアラモス国立研究所の中性子グループと共同で、NOVAの結晶PDF解析性能を検証する。

本事業における最終目標へのアプローチの手法



研究課題	平成19年	平成20年	平成21年	平成22年	平成23年
ハードウェア建設			検出器増設・機器改良		
その場測定実験		機器開発	実験		
解析ソフトウェア開発	既存ソフト	調査・開発	ソフト改良		
水素貯蔵材料実験*		実験内容の検討		実験実施	

図 II-(7) 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」

2.2 研究開発の実施体制

本事業では、(独)産業技術総合研究所エネルギー技術研究部門 副部門長 秋葉悦男氏をプロジェクトリーダーとし、その下に、①金属系材料、②非金属系材料、③材料物性、④計算科学、⑤中性子の5つの研究グループを形成している。本事業は、基礎の立ち返り、かつ、広い分野の研究者の協同によって新たなブレークスルーをもたらすことを目指していることから、サブリーダーとしては、比較的若手であって、各研究分野の第一線で活躍する研究者を登用した。

NEDOは、委託先公募に先立って開催したワークショップ(平成19年2月リーダーとして指名した。そのことによって、広く、研究者と研究アイデアがプロジェクトリーダーの下に集約されることを意図したものである。ただし、採択審査に当たっては、利害関係のない外部有識者による審査によって、公平性、公正性を担保した。

秋葉氏をプロジェクトリーダーとして指名した理由は、大きくは以下の4点である。当該分野において世界第一線の研究者であること、優れたマネジメント能力を有していると認められること(「水素安全利用等基盤技術開発」プロジェクトの水素貯蔵関連の研究実施に当たってリーダー的な役割を果たしている)、国際的にも優れた研究者のネットワークのハブとなっていること(国際エネルギー機関の水素協定の下でのANNEX、米国ロスアラモス国立研究所との研究協力において日本側の研究責任者として指名されていること)、本事業の背景・目的等を熟知していること(本事業立ち上げに際してNEDOが設置した水素貯蔵材料懇談会等において、検討をリード、整理した)。

PLの役割や実績は次のとおりである。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(補正予算などの加速財源による重要課題の選定)、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(学会や産業界における積極的な認知活動)、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など)、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)。

プロジェクトを推進する上で、金属系Gと非金属系Gは、それぞれの保有する水素貯蔵材料に関する材料科学的基礎研究アプローチを活用するとともに、材料物性Gの保有する放射光による構造物性の研究アプローチ、中性子グループの構築する全散乱測定による研究アプローチ、ならびに計算科学グループの保有する材料の特性予測などの研究アプローチを相互補完的・融合的に活用して、プロジェクトの成果最大化を図る。5つの研究グループは、それぞれの保有する研究アプローチによって、水素貯蔵材料の構造解析、貯蔵原理の基礎解明等を進めるにあたって、研究用試料や材料評価・計算結果の受け渡しによる相互補完・協力のみならず、研究手法そのものを共同構築することなどを通して、中間目標としての水素貯

蔵材料の開発指針作成の方向性を定める。さらに、構築した研究手法をフルに活用して材料の評価・解析等を進め、最終目標としてのコンパクトで効率的な水素貯蔵材料の開発指針提供を目指す。



II (29)

図 II-(8) 研究開発の実施体制

水素貯蔵ロードマップ(図 I-(1))のシナリオに示したように、水素貯蔵材料の基盤研究によってもたらされるブレークスルーは、合金系や無機系の水素貯蔵材料の開発に活用され、低コスト・軽量・コンパクト・高耐久で安全な水素貯蔵容器の実現が図られることを想定している。このような成果の受け取り手としては、先にも述べたように、NEDOが「水素製造・輸送・貯蔵システム等技術開発」の中で実施している6つの水素貯蔵材料開発プロジェクトや、水素貯蔵材料を開発している産業界である(図 II-(9))。これらの実用化開発の担い手に対して、積極的に関与を求めるために、本事業の中核的研究機関である産総研を初め委託先が、先進的材料や実用的材料の提供を求め、評価・解析の研究対象とするための公募を行っている。これによって、産業界の材料開発を促進する役割を担うとともに、本事業内の貯蔵原理を解明するための実験解析技術を更に高度化するなどの相乗効果を狙うものである。

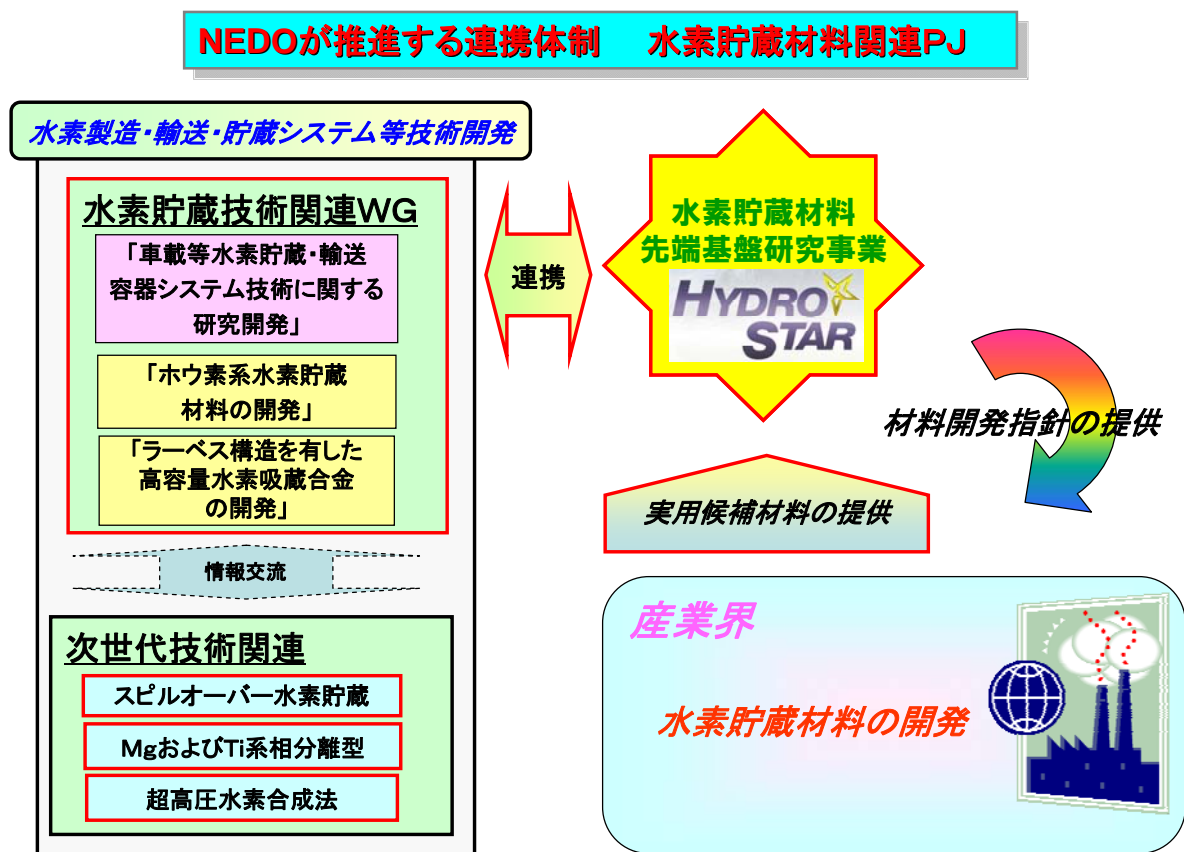


図 II-(9) NEDO が推進する連携体制 水素貯蔵材料関連プロジェクト

2.3 研究の運営管理

NEDOは、経済産業省及びプロジェクトリーダーと密接な連携を持って、目的及び目標に照らし、適切に運営管理することを目指している。

まず、プロジェクト内の検討の場として、リーダー・サブリーダー会議をこれまでに合計6回、各グループ内の連絡会議およびグループ間の意見交換会等を合計30回以上開催し、最新の進捗状況を共有するとともに研究討議を通して、推進を図っている。(詳細は、巻末の添付資料を参照)

一方、外部有識者のアドバイスを得る観点から、推進助言委員会を設置している(表Ⅱ-(2))。委員は、水素貯蔵に係る有識者、関連プロジェクトに関わる有識者、関連企業の研究者、関連業界の技術者より構成している。第1回を平成20年5月26日、第2回を平成21年6月2日に開催し、特に以下のような指摘を受けて、研究計画等に反映させている(表Ⅱ-(3))。

表Ⅱ-(2) 「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	太田 健一郎
委員	(独)産業技術総合研究所 ユビキタスエネルギー研究部門 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 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	市川 政夫
委員	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

表Ⅱ-(3) 推進助言委員会の指摘内容と反映事例

指摘内容	反映事例
「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】 AlH ₃ 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ークスルーとすべく、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

また、研究成果を公表し、広く外部からの意見を伺う観点から、「Hydro☆Star 講演会」等の情報発信の機会を設けている(表Ⅱ-(4))。特に、平成20年2月24日には、「水素貯蔵材料フォーラム2009」を開催し、並行事業「水素製造・輸送・貯蔵システム等技術開発」の6つの水素貯蔵材料関連プロジェクトと本事業の報告による情報交換の機会を設けるとともに、関係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し、両事業の連携にむけた課題共有を図った。本フォーラムによって、NEDOが推進する水素貯蔵材料開発の方向性と連携について、一般に広く知ってもらうための機会を提供するとともに、本事業の成果の活用についても、NEDOが機会を提供することを公表した。そして、本事業で構築された高度な実験・解析技術を活用して、産業界との研究開発の連携を図るために、本事業の委託先からの公募によって、広く産業界から先進的な水素貯蔵材料の提供を受けるための、スキームを構築した。H21年7月現在、第1回の公募結果をもとに、具体的な共同研究に向けた準備を進めている。

事業外部については、平衡事業である「水素製造・輸送・貯蔵システム等技術開発」の中の、車載システム開発や水素貯蔵材料開発のPJとの連携を図るべく、平成21年7月8日に発足させた同事業の「水素貯蔵材料WG」との、研究の最新状況の進捗共有や意見交換を実施していく。

国際的には、米国ロスアラモス研究所(LANL)との共同研究、日中水素貯蔵フォーラム等の機会を通して、本事業の研究成果を積極的に発信して、国際的な研究水準を高め、先導する役割を果たしている。特に、LANLとの共同研究については、中性子散乱による水素の構造物性解明のための重要なアイテムとして、双方のもつ研究上の得意なポイントを活かして、着実な進展が図られているところである。年1回ペースで開催するLANL-AIST/NEDOワークショップをはじめとして、数多くのLANLとの研究交流の機会を通して、産総研の持つ水素雰囲気 In-situ 測定技術とLANLの持つ高度なデータ解析技術を駆使して、水素貯蔵材料の研究の高度化を図っている(表Ⅱ-(5))。

表Ⅱ-(4). プロジェクト推進のために開催した主要な会議及びイベント(国内案件)

主な会議・イベント名 開催日, 場所 参加人数	概要
・水素貯蔵材料フォーラム 2009 ・H21.2.24, 台場 ・約 150 名	水素貯蔵材料の研究開発を推進するために、本事業と並行事業の水素貯蔵材料関連PJについての研究報告と、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。 関連PJ間の連携推進のための、水素貯蔵材料WG開催と、産業界との連携のための本事業実験解析技術の活用のための、共同研究案件の公募を実施。その成果についても、今後発信していく予定。
・Hydro☆Star 講演会 ・H21.3.24, 産総研つくば ・約 30 名	招待講演による研究者の刺激、および研究成果を発信し、外部からの聴講者と討議。 貯蔵材分野で著名な Donald SIEGEL 博士の講演や、実施者以外の研究者からの活発な討議により、研究の進め方の一助とされた。
・アルミハイドライド研究者会議 ・H21.6.22, 産総研関西 ・約 10 名	超高圧水素環境下で直接合成に成功したアルミハイドライドの研究方針について、国内の有力研究者が集結して討議。 関係者で秘密保持契約を締結し、研究進展のために活動継続を確認。
・Hydro☆Star 全体会議 ・H21.7.3, 台場 ・約65名	本事業の16委託先研究機関が集結し、ポスター等による情報共有と研究討議を通して、事業内の研究連携を強化。 プロジェクトの最終目標である水素貯蔵材料の開発指針を得るための具体的な共同可能性を模索する機会。
・水素貯蔵材料関連WG(並行事業) ・H21.7.8, 佐賀大学 ・約 15 名	ハイブリッド水素貯蔵タンクの技術実証や材料開発上の課題を共有し、Hydro☆Star 事業の活用展開について討議。 PLが参加し、情報・技術課題・要望等を共有。

表Ⅱ-(5). プロジェクト推進のために開催した主要な会議及びイベント(国際案件)

主な会議・イベント名 開催日, 場所 参加人数	概要
・日米燃料電池・水素技術ワークショップ 第1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	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。 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。
・日米燃料電池・水素技術ワークショップ第2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
・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議を通じ研究交流の場を提供。
・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。
・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
・ 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。

3. 情勢変化への対応

【体制】

平成 21 年 7 月に、高エネルギー加速器研究機構（中性子グループ）の共同実施先として、ロスアラモス国立研究所を追加した。これは、両者が既に包括的に結んでいる覚書（MOU）に基づくものであり、それぞれのノウハウや研究手法の有効活用を通して、中性子散乱法による水素貯蔵材料の構造・状態解析を高度化することを目的としている。

具体的には、中性子散乱実験によって、複雑な構造を有する無機系水素化物等を対象に、J-PARC 中性子全散乱装置により構造変化の概要を観測するとともに、ロスアラモス国立研究所に設置されている高空間分解能中性子全散乱装置を用いて精密な構造解析を行うものである。

【加速財源】

平成 20 年度には、第 1 次補正予算により、2.1 億円を投入して、主に、水素雰囲気その場測定・観察に関わる研究開発の加速・充実を図った。具体的には、高圧水素雰囲気中の X 線回折測定（産総研）や、SPring-8 のビームラインにおける水素雰囲気中測定試験への設備的対応と X 線検出器や時分割測定の充実（原研）、超高压電子顕微鏡の水素雰囲気中測定用セル（北大）、水素雰囲気中の中性子測定のための機器（高エネ研）などである。これによって、世界に類を見ない水素貯蔵材料研究の高度化が図られつつあり、また産業界への活用機会の提供についても、その実現をめざすところである。

また、平成 21 年度には、第 1 次補正予算により、国際協力に基づく研究案件の加速を図るために、2.7 億円を投入する。これによって、ロスアラモス研との共同研究案件を加速するための研究開発内容を充実させることとしている。具体的には、無機系水素化物等の水素の放出・貯蔵に伴う構造変化を観測するための中性子散乱実験用高温炉や検出器を整備すること（高エネ研）、産総研と高エネ研が実施するロスアラモス研究所との共同研究内容を相補的に検証するために、電解放射型電子銃付き透過電子顕微鏡の軽元素分析機能追加や、水素雰囲気中 NMR 精密測定など、実験室系研究手法の充実を図るものである。

4. 評価に関する事項

事前評価については、平成 17 年度に実施された。「水素貯蔵材料先端基盤研究ワークショップ」（平成 18 年 1 月 22 日開催）により、同基盤研究の内容や技術課題等に対する意見を、水素貯蔵分野に関連する専門家等から聴取して、基本計画の策定等に反映した。事前評価書は、別添のとおり（平成 18 年 2 月 22 日付）。

Ⅲ. 研究開発成果について

1. 特許、成果の普及等

表Ⅲ.1のとおり、研究成果を踏まえてタイムリーに、材料・分析・計算科学分野などを初めとする各種学会の口頭発表や、専門雑誌での論文発表を通して、成果の普及を積極的に進めている。また、特許出願についても、新規性・進歩性の要素がある基礎技術等について、精選された案件を出願している。

表Ⅲ.1 特許・論文件数の一覧（詳細は別紙の成果リスト参照）

		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解明」	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盤研究」	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

IV. 実用化の見通しについて

1. 成果の実用化について

本事業では、水素貯蔵材料の先端的な基盤研究成果を実用化に結びつける道筋として、産業界に対して材料開発指針を提供することを目指している。平成19年度から平成21年度までの当初3年間においては、世界最高性能を誇る中性子全散乱装置による物質の構造・状態解析の研究基盤や、放射光による高圧・高温など極限環境下における材料研究基盤を初めとする、水素貯蔵材料の研究開発に必要なかつ有効な、様々な実験環境・計算科学的基盤が整うとともに、それらを活用して産業界等との連携を図るところである。

具体的には、並行事業である「水素製造・輸送・貯蔵システム等技術開発」の中で実施している、水素貯蔵材料関連の個々のプロジェクト「車載等水素貯蔵・輸送容器システム技術に関する研究開発」、「ホウ素系水素貯蔵材料の開発」ならびに「ラーベス構造を有した高容量水素吸蔵合金の開発」から、それぞれ水素貯蔵材料の研究用試料が提供され、本事業により構築された研究基盤を活用して測定・観察等がなされ、実験・解析結果が提供される。特に、車載用水素貯蔵システムは、高圧水素圧縮貯蔵技術と水素貯蔵材料を組み合わせたハイブリッドタンクとして、車載に求められるコンパクトなシステムが期待されていることから、高圧水素中における貯蔵材料の実用特性改善に繋がる基礎研究的知見が本事業より提供され、システム技術開発が加速されることが期待される。また、同並行事業の次世代技術開発プロジェクトである、「ゼオライト鋳型炭素をベースとしたスピルオーバー水素貯蔵に関する研究開発」では、本事業の計算科学的アプローチを持つ委託先との共同により、研究開発の推進が図られるところである。このように、NEDOの関連事業間における連携が着実に進められることによって、本事業の実験解析技術のさらなる高度化と、産業界等における材料開発の加速の両方の効果が期待される。

さらに、本事業では、産業界等との連携を推進する一環として、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を実施している。具体的には、本事業の中核的研究機関である独立行政法人産業技術総合研究所を初めとする委託先が、所定の公募要綱により、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、広く募集するものである。以下に、第1回公募の対象案件について、研究開発項目毎に記す。

1.1 「金属系水素貯蔵材料の基礎研究」

1.1.1 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月より運用開始可能）

【測定の概要】

任意の水素吸蔵・放出状態において、貯蔵材料の粉末X線回折を「その場」測定する。回折パターンを解析することにより、材料が水素を吸蔵した時の結晶構造、格子の膨脹、格子歪み生成などの情報が得られる。また、吸蔵量の変化に伴う相変化や分解反応の有無なども調べることができる。P-C曲線を測定しながら、これに沿って測定することも可能。

【測定条件】

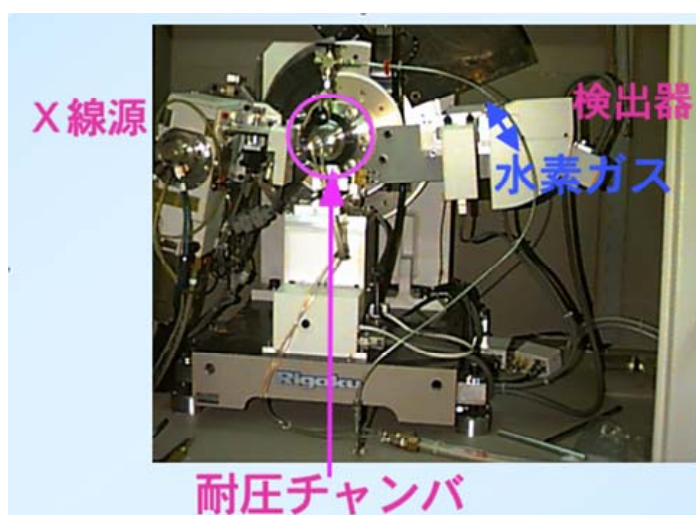
試料の量：金属材料の場合、2～3 g（粉末状）

温度、圧力：室温～200℃、真空～1 MPa（標準設定）

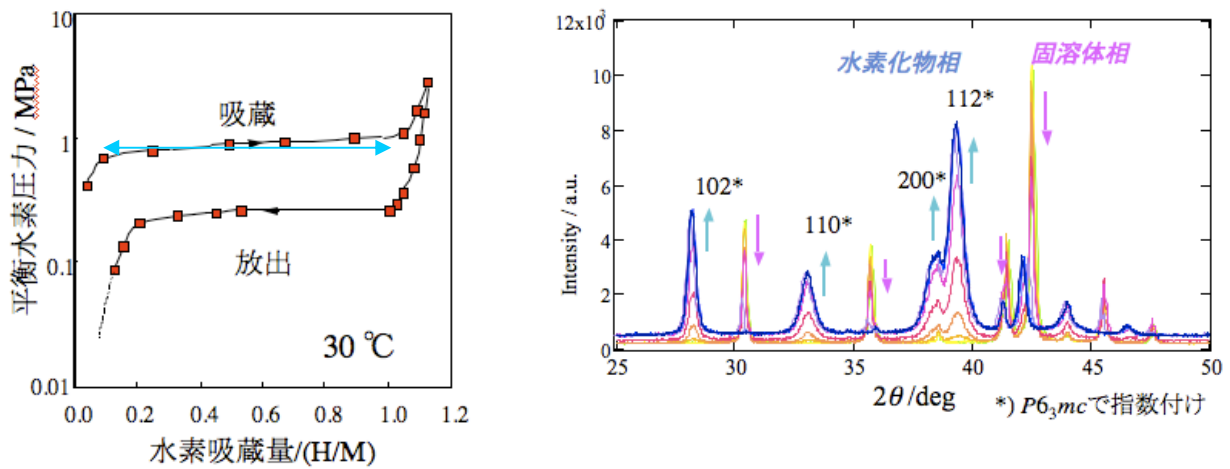
この範囲外については、個別に検討可能

【期待される効果】

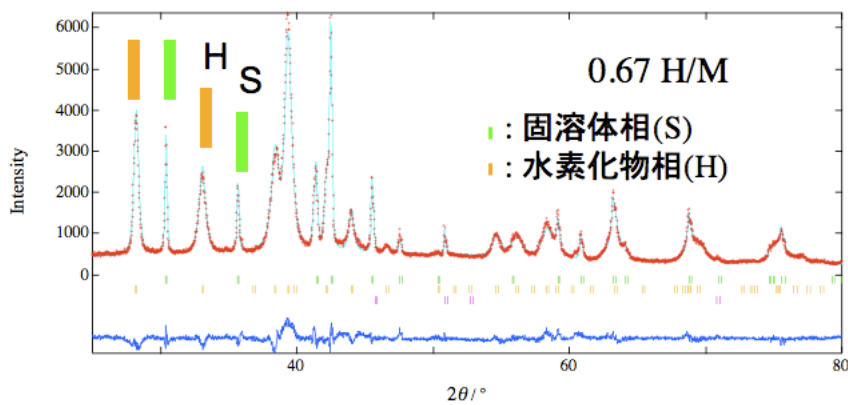
大気中では水素吸蔵状態を保持できない材料について、水素化物相の生成を直接確認することができる。新規な水素化物が生成している場合、回折パターンからその同定が可能である。水素の吸蔵・放出に伴う構造の変化や格子歪みの生成を調べることにより、水素化反応のメカニズム、繰り返し特性、水素化物相の安定性などについての議論に有用な情報が得られるものと期待される。



図IV1.1.1-(1) その場X線回折装置の外観写真



図IV1.1.1-(2) LaNi₅の1回目の水素吸蔵・放出時のP-C曲線(左), 吸蔵曲線に沿って測定したXRDパターンの変化(右);P-C曲線の矢印で示した部分が二相共存領域



図IV1.1.1-(3) LaNi₅の1回目吸蔵時, 二相共存状態の回折パターンのリートベルト解析固溶体相にはほとんど歪みが入っていないのに対し, 水素化物相には2%程度の異方性の歪みが生成していることがわかった。

【参考文献】 Y. Nakamura and E. Akiba, J. Alloy Compd., 308 (2000) 309.

1.1.2 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

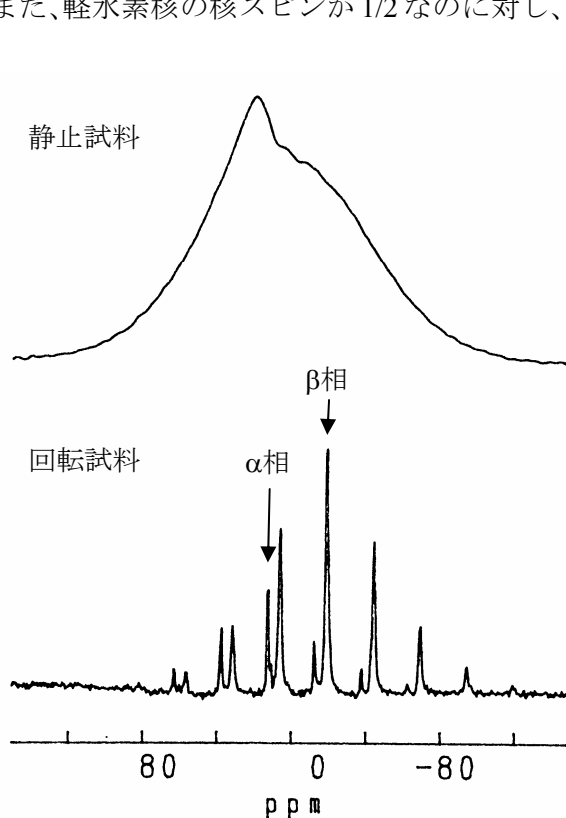
(H21年9月より運用開始可能)

【技術の目的・内容】

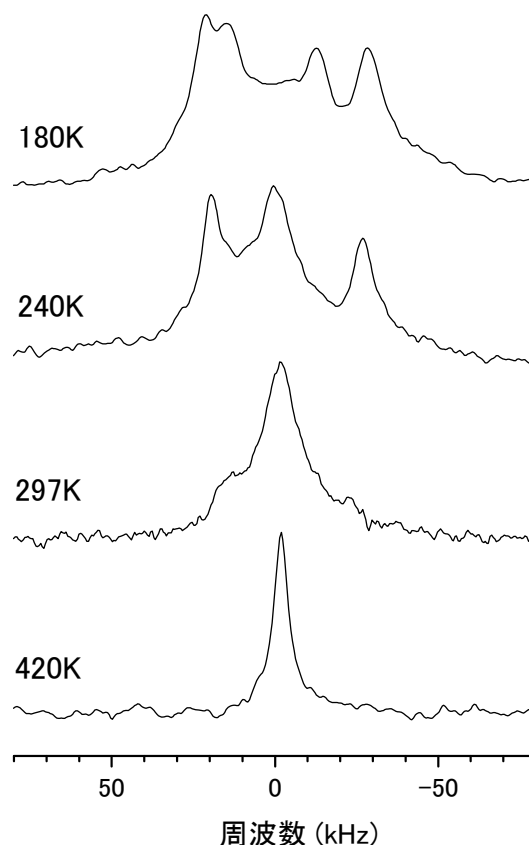
固体NMRでは、水素・重水素のシグナルを直接観測して、それらの存在状態を知ることができる。回折法が長周期構造を調べるのに対し、NMRでは原子スケールでの局所構造を調べる。このため、固体NMRでは、測定対象が結晶質であろうと非晶質であろうと測定自体には影響しない。金属水素化物をはじめ、固体中における水素を観測することにより、水素のサイトや結合状態、拡散挙動、電子状態などについて有益な知見が得られる。

軽水素 (H) は天然存在比がほぼ 100% であり、軽水素核 (プロトン) は NMR 観測において実質的にもっとも感度が高い核種である。固体試料の ^1H NMR スペクトルはしばしば数十 kHz の線幅を示すが、この線形を解析することにより、水素のサイトや分布、さらには拡散速度を知ることができる。また、試料の高速回転技術を用いることにより、高分解能スペクトルを得ることができる。たとえば、**図IV1.1.2-(1)** に Nb 水素化物の例を示した。 α 相と β 相のシグナルが分離して観測され、2相が混在していることがわかる。

重水素 (D) は天然存在比が低く、重水素核の感度も軽水素核に比べると格段に低い。また、軽水素核の核スピンの $1/2$ なのに対し、



図IV1.1.2-(1) Nb 水素化物の ^1H NMR スペクトル



図IV1.1.2-(2) バナジウム重水素化物の ^2H NMR スペクトル

重水素核は1である。すなわち、重水素核は四極核であり、核周辺の電場勾配を反映した特徴的なスペクトルを示す。この性質を利用して、重水素のサイトを区別して観測することが可能である。たとえば、**図IV1.1.2-(2)** にバナジウム重水素化物の²H NMR スペクトルを示した。180 Kにおいて4本のピークが観測された。2本ずつの2組に分けられ、外側2本が八面体サイトの重水素、内側2本が四面体サイトの重水素に帰属される。温度を上昇させるとスペクトルの線形が変化して、重水素が拡散するようになることを示した。

【活用形態】

- ・ 既知量の水素を含有した試料の提供を受け、原則 *ex situ* の測定を行う。
- ・ 空気に触れさせないで固体NMR測定を行うことは可能。
- ・ 測定上、一定の制約条件の下、10気圧までの水素雰囲気下での固体NMR測定が可能。
- ・ 試料の高速回転を用いた固体高分解能測定は不可。

【期待成果】

固体中における軽水素・重水素を選択的に直接観測して、その存在状態（結合、サイト、運動）についての情報を得ることが可能である。非晶質系、複合系であっても、同様の情報が得られる。

1.1.3 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月より運用開始可能)

【陽電子消滅法の原理】

陽電子消滅法は、材料中に存在する転位や空孔・空孔集合体などの空孔型欠陥を敏感に検出し、空孔型欠陥の種類と同定と濃度の定量的な評価が可能な数少ない手法の一つである。

図IV1.1.3-(1)は様々な状況における陽電子の消滅場所を模式的に表す。試料中に空孔型欠陥が存在しない場合、陽電子は主に格子間位置で電子と対消滅する。一方、空孔型欠陥が存在する場合、この部分は相対的に負に帯電しているため、陽電子は空孔型欠陥部で捕獲され、そこで電子と対消滅する。陽電子消滅実験では、この空孔型欠陥での陽電子の捕獲現象を利用し、陽電子の試料内部での生存時間(寿命)や消滅 γ 線のエネルギー変化から空孔型欠陥についての情報を抽出する。

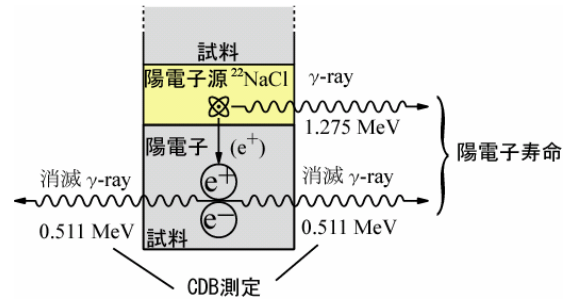
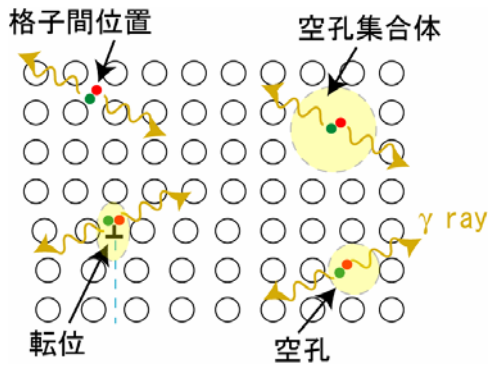
【陽電子寿命測定の概要】

上述のように、陽電子は空孔型欠陥に引き寄せられ、捕獲される。そして、空孔型欠陥部では電子密度が格子間位置に比べて低いため、陽電子は比較的長時間試料内部で生存できる。この陽電子の寿命の違いを測定することで、空孔型欠陥の種類を識別することができる。参考のため、 LaNi_5 における陽電子の異なる消滅場所での陽電子寿命値を表IV1.1.3-(1)に示す。陽電子寿命が空隙サイズの増大とともに長くなり、欠陥種類の固有の値を示すことがわかる。

次に図IV1.1.3-(2)を用いて陽電子寿命測定の方法について説明する。陽電子は $^{22}\text{NaCl}$ の β^+ 崩壊により生成される。このとき、1.275 MeVの γ 線も同時に放出される。この γ 線を陽電子の生まれた時刻としてシンチレーションカウンターで検出する。陽電子が試料内部で電子と出会う対消滅する際に、0.511 MeVのエネルギーを持った2本の γ 線が反対方向に放出される。この一方を陽電子が消滅した時刻として検出することで陽電子の寿命を測定する。

表IV1.1.3-(1) LaNi_5 中の各陽電子消滅場所での陽電子寿命値

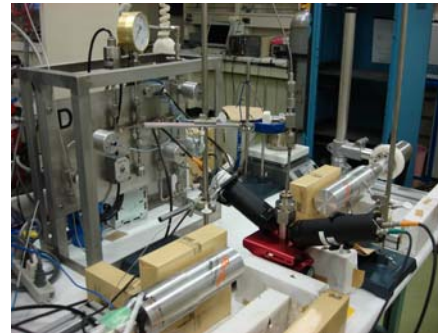
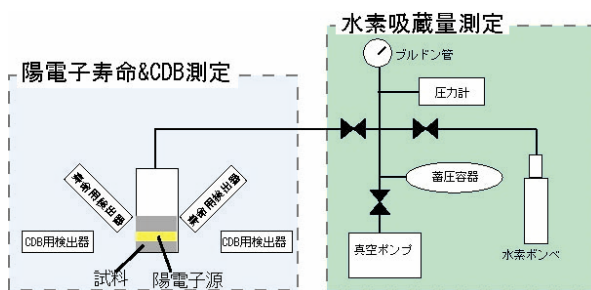
	完全結晶	転位	空孔
陽電子寿命値	約 125ps	約 150ps	約 170-180ps



図IV1.1.3-(1) 試料内部での陽電子の消滅サイト

図IV1.1.3-(2) 陽電子消滅実験の原理

●電子 ●陽電子



図IV1.1.3-(3) 高圧水素雰囲気中での陽電子消滅実験装置

【同時係数ドップラー幅広がり (CDB) 測定の概要】

消滅 γ 線のエネルギーは、陽電子と消滅する電子の運動量の大きさに起因して若干変化する。内殻電子は価電子に比べて大きな運動量分布を有しているため、内殻電子と消滅した陽電子から発生した消滅 γ 線のエネルギーの変化量は、価電子と消滅したものに比べて大きい。そのため、エネルギー変化の大きな領域を評価することで内殻電子の情報を得ることができる。また、一般的に、内殻電子の運動量分布は構造・組成にほとんど依存しないため、得られた内殻電子の情報から、陽電子の消滅相手の元素の同定が可能となる。CDB測定では、陽電子の消滅時に放出される2本の消滅 γ 線のエネルギーを2本の半導体検出器を用いて同時に測定し、内殻電子の情報を抽出する。

【活用形態】

- ・水素吸蔵材料の水素吸蔵・放出時の欠陥の形成の検出
- ・材料間での欠陥量，欠陥安定性の比較
- ・吸蔵・放出の繰り返し時の欠陥量変化の検出
- ・欠陥の周囲の元素の同定（元素により判別の難易度は異なる）

いずれも、水素圧力下での” その場 ” 実験が可能

P-C 曲線に沿った測定も可能

必要な試料重量は 3~5 グラム程度

試料の取り扱いとして、

グローブボックスを用いることで、試料調整から測定までの一連のプロセスを大気非接触で行うことも可能

前処理として、上限 150°Cでの脱気が可能

【期待される成果】

合金系：

水素との反応時に導入される格子欠陥の形成・消滅現象を観察することができる。格子欠陥の蓄積と耐久性には相関があるため、格子欠陥の情報を得ることで耐久性向上のための指針が得られる可能性がある。

錯体系：

錯体系材料は、水素貯蔵・放出反応時に水素の出入りだけでなく、構成元素の拡散を伴う。本手法では、この原子拡散に必要な空孔の形成挙動を得られるため、反応速度向上のための指針が得られる可能性がある。

【参考：これまでに本手法により得られた成果】

The effect of substitutional elements (Al, Co) in $\text{LaNi}_{4.5}\text{M}_{0.5}$ on the lattice defect formation in the initial hydrogenation and dehydrogenation : *Journal of Alloys and Compounds*, 473 (2009) 87-93

LaNi_5 系合金の水素吸蔵反応における格子欠陥形成に対する元素置換の影響を調べた。研究したすべての合金系で空孔と転位が形成された。Al を置換することで空孔濃度が LaNi_5 に比べて一桁低くなることを明らかとした。

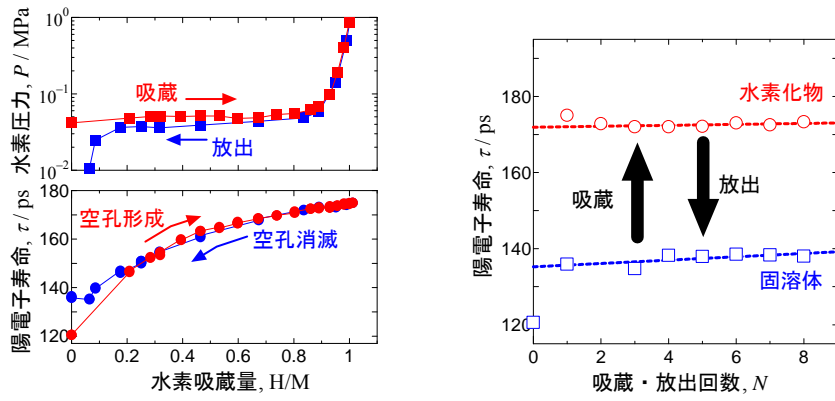
• Behavior of vacancy formation and recovery during hydrogenation cycles in $\text{LaNi}_{4.93}\text{Sn}_{0.27}$: *Journal of Alloys and Compounds*, in Press

$\text{LaNi}_{4.93}\text{Sn}_{0.27}$ の水素吸蔵・放出サイクルに伴う空孔型欠陥の形成過程を観察した。水素化で形成された空孔が水素の放出過程で回復し、試料内部に蓄積されないことを見出した。

Reversible vacancy formation and recovery during dehydrogenation-hydrogenation cycling of Ti-doped NaAlH_4 : 投稿中

NaAlH_4 の脱水素化・再水素化反応における欠陥構造の変化を調べた。脱水素化反応時に空孔

が形成され、水素化過程において導入された空孔が消滅することを見出した。



図IV.1.1.3-(4) $\text{LaNi}_{4.93}\text{Sn}_{0.27}$ の高圧水素雰囲気中での陽電子消滅実験結果

1.2 「非金属系水素貯蔵材料の基礎研究」

1.2.1 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07月より運用可能)

【技術の目的・内容】

高圧セル(図参照)を用いて、5MPa以下の水素雰囲気及び加熱状態(最高450°C)での光学顕微鏡観察が実施可能。水素吸蔵/放出反応のその場観察を行う。



光学顕微鏡



高圧セル

図IV1.2.1-(1) 光学顕微鏡を用いたその場観察システム

【活用形態】

各種粉末試料、薄膜試料の観察が可能。加熱は室温～450°Cまで対応可能。

【期待成果】

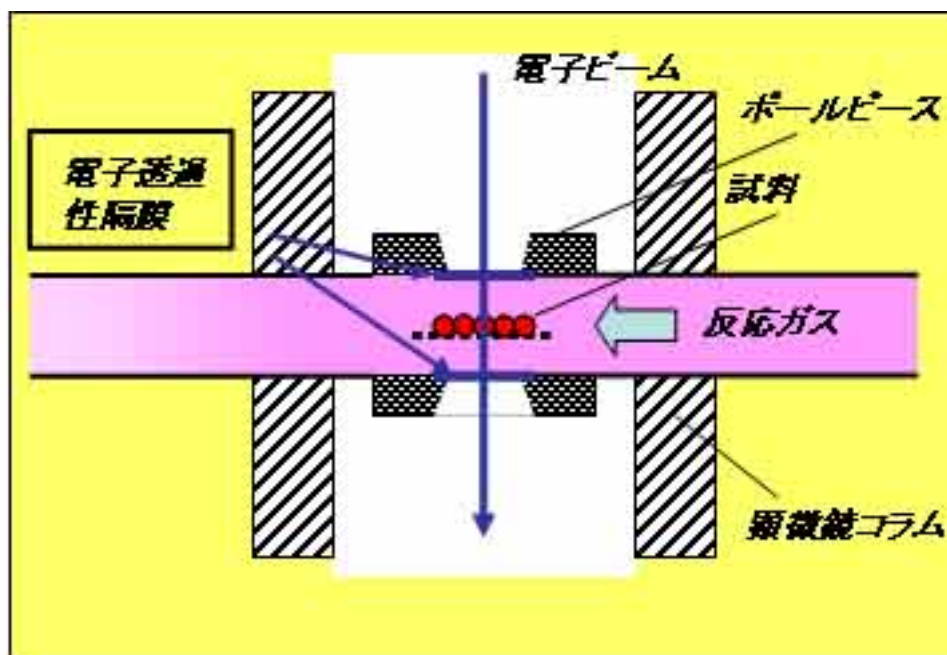
水素吸蔵/放出反応に関与するモルフォロジーの変化が観察できる。

1.2.2 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 (H21年9月より運用可能)

【技術の目的・内容】

環境セルホルダ（図IV1.2.2-(1)参照）を用いて、0.2MPa以下の水素雰囲気及び加熱状態での透過電子顕微鏡観察が実施可能。水素吸蔵/放出反応のその場観察と、構造解析を行う。



図IV1.2.2-(1) クローズ型環境セル

【活用形態】

各種粉末試料、薄膜試料の観察が可能。加熱は室温～150℃程度まで対応可能。

【期待成果】

水素吸蔵/放出反応機構解明および水素吸蔵/放出反応に関与する触媒機構の解明が期待できる。

【参考文献】

- 1) K. Okudera, K. Hamada, T. Suda, N. Hashimoto, S. Ohnuki, Development of Environmental Cell for Gas Reaction of Nano-size Particles, Advanced Materials Research, vol. 26-28, 877-880, 2007
- 2) 科学新聞, 2008年7月4日 3201号

1.3 「水素と材料の相互作用の実験的解明」

1.3.1 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 (H21年10月より運用可能)

【技術の目的・内容】

水素貯蔵材料における水素の結合状態や、そのダイナミクスの観測は水素吸放出特性を理解する上で重要である。固体NMRによる測定は原子レベルでの観測が可能なため有用な手法だが、実際の水素吸放出条件で観測されている例は少ない。そこで、本研究開発では表IV.1.3.1-(1)に示すような仕様の水素吸放出条件下高温NMRプローブおよび雰囲気制御試料ホルダーの開発を行った。

開発したシステムはガス圧力・流量制御部、プローブ部、サンプルホルダー部からなり水素またはアルゴン雰囲気下で試料温度を350℃まで昇降温可能であるとともに、一定流量条件下で、雰囲気圧力を1MPa(絶対圧)まで加圧制御可能である。

【活用形態】

固相および液相試料の測定が可能。水素含有量により数100mgから数gの試料量が必要。事前に、測定条件下(温度・雰囲気)において試料管(石英及びアルミナ)との反応性を確認する必要がある。

【期待成果】

水素加圧下かつ高温でのNMR測定が可能であり、金属系や非金属系水素貯蔵材料において、水素量、配位数、さらには拡散係数に関する知見が得られると期待される。

【参考文献】

- 1) K. Kawata *et. al.*, *Solid State Ionics*, **177** (2006) 1687.
- 2) M. Matsuo *et. al.*, *Appl. Phys. Lett.* **91** (2007) 224103.
- 3) H. Maekawa *et. al.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **131** (2009) 894.

表IV.1.3.1-(1) 開発したNMRプローブ・ホルダーの仕様

項目	仕様
NMR分光装置 (東北大学工学研究科)	Chemagnetics 社製 CMX Infinity 300 wide bore
励磁性能	300 MHz、7 T
観測核種	^1H 、 ^7Li 、 ^{11}B 、 ^{27}Al
温度制御方式	N ₂ 加熱方式
試料温度範囲	室温 - 350℃
雰囲気	H ₂ 、Ar、H ₂ +Ar
ガス流量	H ₂ 、Ar 各最大 100 ml/min
試料管内圧力範囲	0.1 - 1.0 MPa (絶対圧)
到達真空度	14Pa 以下

1.4 「計算科学による水素貯蔵材料の基盤研究」

1.4.1 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

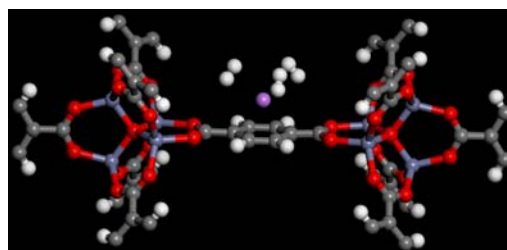
東北大学 金属材料研究所 (H21年7月より運用開始可能)

【技術の目的・内容】

有機金属構造体(Metal Organic Framework, MOF)中のリンカー及び金属イオンを可能な限り様々に変更した場合の水素貯蔵能力への影響を第一原理シミュレーション計算によって詳細に算定する。その結果を、応募元から提供される実験による合成・測定結果と比較・検討し、より高精度で予測能力のある計算手法の確立と新規MOFの提案を目指す。

【解析事例】

MOF は水素貯蔵材料として注目を集めている新しい材料であるが、その吸着が弱いことが問題であった。本所属機関では、MOF-5 に Li を付加させることにより水素分子の吸着エネルギーを増加させ、実用に適した値に改善することを第一原理計算により明らかにした。



図は、MOF-5 を構成するリンカーのベンゼン環の上に Li を置き、その周囲に3個の水素分子を吸着させた様子を示している。

【活用形態】

既に実験から得られているリンカー、金属イオン、結晶構造の情報をもとに、未知のリンカーや金属イオンに対して、金属材料研究所で確立している第一原理シミュレーション計算手法により、水素分子の吸着量、吸着サイト、及び吸着エネルギーを定量的に求める。

この際、計算の初期条件を決定するために、原子座標データを必要とする。

【期待成果】

水素貯蔵材料に適する高吸蔵量及び適正な吸着・放出特性を有する新規 MOF を提案し、共同研究先の合成技術により実証することを目指す。

【参考文献】

N. S. Venkataramanan, R. Sahara, H. Mizuseki, and Y. Kawazoe, “Probing the Structure, Stability and Hydrogen Adsorption of Lithium Functionalized Isorecticular MOF-5 (Fe, Cu, Co, Ni and Zn) by Density Functional Theory”, *Int. J. Mol. Sci.* (2009), 10, 1601-1608

1.5 「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」

・ 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

2. 波及効果

本事業における研究開発は、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を高度化することを通して、材料科学・技術の進歩に対しても大きく貢献するものであり、J-PARC における中性子全散乱装置による高度な材料解析手法の構築を初めとする様々な研究成果については、その汎用性・応用性が極めて高いといえる。したがって、本事業の成果は、水素貯蔵材料の実用普及にむけた研究開発のみならず、2次電池用材料など、他のエネルギー関連分野も含めて広く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ものである。

また、本事業を開始するにあたっては、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され、様々な分析技術・材料研究の専門家として、今日に至るまで水素貯蔵材料の基本原理解明に向けて課題に取り組んでいる。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られている状況において、本事業に携わる多くの研究者が、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があるとともに、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するという、大きな波及効果が期待される。

エネルギーイノベーションプログラム基本計画

1. 目的

資源に乏しい我が国が、将来にわたり持続的発展を達成するためには、革新的なエネルギー技術の開発、導入・普及によって、各国に先んじて次世代型のエネルギー利用社会の構築に取り組んでいくことが不可欠である。他方、エネルギー技術開発は、長期間を要するとともに大規模投資を伴う一方で将来の不確実性が大きいことから、民間企業が持続的な取組を行うことは必ずしも容易ではない。このため、政府が長期を見据えた将来の技術進展の方向性を示し、官民双方がこの方向性を共有することで、長期にわたり軸のぶれない取組の実施が可能となる。

エネルギー安全保障の確立や、世界全体の温室効果ガスを 2050 年までに半減するという長期目標を達成するため、以下に政策の柱毎に目的を示す。

1-1. 総合エネルギー効率の向上

1970 年代以来、官民をあげて省エネルギーに取り組み、産業構造の転換や新たな製造技術の導入、民生機器の効率改善等により世界最高水準の省エネルギーを達成している。今後、「新・国家エネルギー戦略」に掲げる、2030 年までに GDP あたりのエネルギー利用効率を約 30% 向上を実現していくためには、産業部門はもとより、全部門において、総合エネルギー効率の向上に資する技術開発とその成果の導入を促進する。

1-2. 運輸部門の燃料多様化

ほぼ 100% を石油に依存する運輸部門は、我が国エネルギー需給構造上、最も脆弱性が高く、その需給構造の次世代化は、将来に向けた早急な対策が不可欠な課題となっている。

「新・国家エネルギー戦略」に掲げる目標（2030 年に向け、運輸部門の石油依存度が 80% 程度となることを目指す）の実現のためにも、官民が中長期的な展望・方向性を共有しつつ、技術開発と関連施策を推進する。

1-3. 新エネルギー等の開発・導入促進

太陽光、風力、バイオマスなどの新エネルギーは、エネルギー源の多様化や地球温暖化対策の観点から重要である。しかし、現時点では経済性や出力安定性といった普及へ向けての課題が存在する。

そのため、これらの課題解決に向けた技術開発の推進及び新エネルギーの導入促進のための関連施策の実施により、更なる新エネルギーの普及を推進する。

1-4. 原子力等利用の推進とその大前提となる安全の確保

原子力発電は供給安定性に優れ、運用時に CO₂ を排出しないクリーンなエネルギー源である。安全確保を大前提に核燃料サイクルを含む原子力発電を着実に推進する。

1-5. 化石燃料の安定供給確保と有効かつクリーンな利用

化石燃料資源の大宗を輸入に依存する我が国にとって、その安定供給の確保は国家安全保障に直結する課題である。このため、石油・天然ガス等の安定供給確保を目指し、我が国企業による資源国における資源開発等に対する支援等の施策を進めるとともに、その有効かつクリーンな利用を図る。

2. 政策的位置付け

低炭素社会づくり行動計画（2008年7月閣議決定）

2008年6月の福田総理（当時）のスピーチ「福田ビジョン」等を受け、我が国が低炭素社会へ移行していくための具体的な道筋を示すため、国全体を低炭素化へ動かす仕組みや革新的な技術開発、国民一人ひとりの行動を促すための取組について策定。

「環境エネルギー技術革新計画」や「Cool Earth - エネルギー革新技術計画」等に示された革新的技術の開発に5年間で300億ドル程度を投入するという具体的な目標が示された。

環境エネルギー技術革新計画（2008年5月）

温室効果ガスの大幅な削減を目指すだけでなく、エネルギー安全保障、環境と経済の両立、開発途上国への貢献等を考慮し、以下の戦略等を策定。

1. 低炭素社会実現に向けた我が国の技術戦略
2. 国際的な温室効果ガス削減策への貢献策
3. 革新的環境エネルギー技術開発の推進方策

Cool Earth - エネルギー革新技術計画（2008年3月）

2007年5月の総理イニシアティブ「クールアース50」を受け、世界全体の温室効果ガスの排出量を現状に比して2050年までに半減するという長期目標を達成するため、エネルギー分野における革新的な技術開発について検討をおこない、21の技術を選定。

エネルギー基本計画（2007年3月閣議決定）

重点的に研究開発のための施策を講ずべきエネルギーに関する技術及びその施策として、

1. 総合エネルギー効率の向上に資する技術
2. 原子力利用の推進とその大前提となる安全の確保に資する技術
3. 運輸部門のエネルギー多様化に資する技術
4. 新エネルギーに関する技術
5. 化石燃料の安定供給確保と有効かつクリーンな利用に資する技術

以上が位置づけられている。

新・国家エネルギー戦略（2006年5月）

世界最先端のエネルギー需給構造の実現を図るため

1. 省エネルギーフロントランナー計画
2. 運輸エネルギーの次世代化計画
3. 新エネルギーイノベーション計画
4. 原子力立国計画

以上の計画が位置づけられている。また、資源外交、エネルギー環境協力の総合的な強化を図るため、「総合資源確保戦略」が位置づけられている。

第3期科学技術基本計画（2006年3月閣議決定）

国の存立にとって基盤的であり国として取り組むことが不可欠な研究開発課題を重視して研究開発を推進する「推進4分野」であるエネルギー分野、分野別推進戦略（2006年3月総合科学技術会議）における「推進4分野」であるエネルギー分野に位置付けられている。

経済成長戦略大綱（２００６年７月財政・経済一体改革会議）

資源・エネルギー政策の戦略的展開として

- １．省エネルギーフロンティア計画
- ２．次世代自動車・燃料イニシアティブ等による運輸エネルギー次世代化
- ３．新エネルギーイノベーション計画
- ４．原子力立国計画
- ５．資源外交、環境・エネルギー協力等の総合的な強化

以上が位置づけられている。

京都議定書目標達成計画（２００５年４月閣議決定）

「京都議定書の約束を達成するとともに、更に「脱温暖化社会」に向けて長期的・継続的な排出削減を進めるには、究極的には化石燃料への依存を減らすことが必要である。環境と経済の両立を図りつつ、これらの目標を達成するため、省エネルギー、未利用エネルギーの利用等の技術革新を加速し、効率的な機器や先進的なシステムの普及を図り、世界をリードする環境立国を目指す。」とされている。

３．達成目標

３－１．総合エネルギー効率の向上

転換部門における「エネルギー転換効率向上」、産業部門における「製造プロセス効率向上」、民生・運輸部門における「省エネルギー」などにより、GDP当たりのエネルギー消費指数を２０３０年度までに少なくとも３０％改善することを目指す。

３－２．運輸部門の燃料多様化

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％程度とすることを目指す。

３－３．新エネルギー等の開発・導入促進

太陽光、風力、バイオマスなどの新エネルギーの技術開発や燃料電池など革新的なエネルギー高度利用を促進することにより、新エネルギー等の自立的な普及を目指すことで、エネルギー源の多様化及び地球温暖化対策に貢献する。

３－４．原子力等利用の推進とその大前提となる安全の確保

２０３０年以降においても、発電電力量に占める比率を３０～４０％程度以上とすることを目指すため、高速増殖炉サイクルの早期実用化、既設軽水炉代替へ対応する次世代軽水炉の開発、軽水炉技術を前提とした核燃料サイクルの確立、放射性廃棄物対策などの技術開発を推進する。

３－５．化石燃料の安定供給確保と有効かつクリーンな利用

石油・天然ガスの化石燃料の安定供給確保を目指し、資源獲得能力の強化に資する先端的な技術開発を推進するとともに、環境負荷低減のために化石燃料の効率的かつクリーンな利用を促進するための技術開発・導入を目指す。

4. 研究開発内容

4 - . 総合エネルギー効率の向上

4 - - . 共通

(1) 省エネルギー革新技术開発事業(運営費交付金)

概要

テーマ公募型事業として、「Cool Earth-エネルギー革新技术計画」に基づき、「先導研究」、「実用化開発」及び「実証研究」の3つの技術開発フェーズに加え、「挑戦研究」フェーズを追加し、革新的な省エネルギー技術の開発を行う。

技術目標及び達成時期

世界全体の温室効果ガス排出量を現状に比べて2050年までに半減するという長期目標を実現するための「Cool Earth-エネルギー革新技术計画」の主旨に基づき、大幅な省エネルギー効果を発揮する革新的なエネルギー使用合理化技術について研究開発・実用化を推進する。

研究開発時期

2003年度～2013年度

(2) エネルギー使用合理化産業技術研究助成事業(運営費交付金)

概要

産業界や社会のニーズに応える省エネルギー技術のシーズの発掘とその育成、並びに、省エネルギー技術に関する次世代の研究リーダーの育成を図る。この目的のため、産業界からの期待が高い技術領域・課題を提示した上で、大学や独立行政法人の研究者等から研究開発テーマを募集する。厳正な外部評価によって省エネルギー効果があり且つ独創的・革新的なテーマを選定し、研究者代表者個人を特定して助成金を交付する。

技術的目標及び達成時期

独創性のある研究者等を助成すると共に、中間評価ゲート方式が醸成する競争的環境の下で企業との連携を強化させることにより、10～15年後の実用化が有望な革新的省エネルギー技術の研究開発を促進する。本事業では革新的省エネルギー技術の実用化への第1歩となる特許について、助成期間終了後の出願比率を100%とすることを目標とするとともに、省エネルギー技術に関する次世代の研究リーダーの育成を図る。

研究開発期間

2000年度～

(3) 新エネルギー技術実用化補助事業(運営費交付金)(4 - - 参照)

(4) 非化石エネルギー産業技術研究助成事業(運営費交付金)(4 - - 参照)

4 - - . 超燃焼システム技術

(1) 環境調和型製鉄プロセス技術開発(運営費交付金)(再掲)

概要

高炉ガスからの効率的な二酸化炭素分離と中低温排熱の有効活用及び水素を炭素(コークス)の一部代替として鉄鉱石を還元する革新的製鉄プロセスの開発を行う。

技術的目標及び達成時期

最終的な技術開発目標として製鉄プロセスにおけるCO₂排出量を30%削減することを目指し、2050年までに実用化する。

研究開発期間

2008年度～2017年度

(2) 資源対応力強化のための革新的製鉄プロセス技術開発(運営費交付金)

概要

高品位な製鉄材料(鉄鉱石・石炭等)の入手が困難になってきていることから、原料使用量の低減及び、比較的入手が容易な低品位原料の使用拡大を図ることが喫緊の課題となっている。本技術開発では、還元剤として低品位な石炭と鉄鉱石の塊成物を開発し、炉内反応の高速化・低温化を実現することにより、省エネルギーで高効率な革新的製鉄プロセスを開発する。

技術的目標及び達成時期

2011年度までに、革新的塊成物の組成・構造条件の探索、革新的塊成物の製造プロセス、革新的塊成物による高炉操業プロセスを開発する。これらによる効果は、年産400万トン規模の中型高炉に適用した場合の炭材使用量のうち高品位炭使用量が約80%から50%程度に削減可能となるとともに、革新的塊成物を高炉に使用する操業技術の改良による還元材比の低減により、新開発のプロセスを含めた製鉄プロセスでの投入エネルギーは約10%削減される。

研究開発期間

2009年度～2011年度

(3) 革新的ガラス溶融プロセス技術開発(運営費交付金)

概要

プラズマ等による高温を利用し瞬時にガラス原料をガラス化することにより、極めて効率的にガラスを気中で溶融(インフライトメルティング法)し省エネに資する革新的ガラス溶融プロセス技術を開発する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

技術的目標及び達成時期

2012年度までに、インフライトメルティング法により原料を溶解する技術、カレットをガラス原料として利用するため高効率で加熱する技術、カレット融液とインフライトメルティング法による原料融液とを高速で混合する技術を開発する。

研究開発期間

2008年度～2012年度

(4) 革新的マイクロ反応場利用部材技術開発(運営費交付金)

概要

エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものであり、マイクロリアクター、ナノ空孔などの精密反応場を利用し、反応分子の自由な運動を活性種レベルで制御した革新的な化学反応プロセスと新機能材料創成技術の確立を目指す。さらに、マイクロリアクターとナノ空孔反応場の組み合わせ、各反応場とマイクロ波等のエネルギー供給手段との組み合わせにより協奏的反応場を構成し、さらなる高効率生産等を可能にする基盤技術を開発する。これらの技術の確立により、反応システムの小型化、多段プロセスの簡略化等を通じた化学産業の製造工程等の省エネルギー化を図る。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

技術的目標及び達成時期

2010年度までに、マイクロリアクター技術、ナノ空孔技術を軸とし、これらに更にマイクロ波、超臨界流体等のエネルギー供給手段を組み合わせた協奏的反応場を構成することにより、これまでにない革新的な化学反応プロセスを確立し、新機能材料創成技術を実現する。さらに、これらの技術を用いて高性能・高機能電子材料、医薬中間体などの部材を開発する。

研究開発期間

2006年度～2010年度

(5) 鉄鋼材料の革新的高強度・高機能化基盤研究開発(運営費交付金)

概要

プラント、構造物や自動車等の革新的な高効率化、省エネルギー化、長寿命化、安全・安心化を図るため、最新の科学的知見を導入し、鉄鋼材料及び鋼構造物を超高機能化する基盤的研究開発を行う。具体的には、高強度鋼、高機能鋼の実用化拡大の基盤となる(1)高級鋼厚板(高強度鋼、極低温用鋼、耐熱鋼)溶接部の信頼性・寿命を大幅に向上する溶接施工技術(高密度・清浄熱源溶接技術)及びクリープ破壊、金属組織制御技術を基本とする溶接材料技術(クリープ破壊及び水素破壊の機構解明等を踏まえた)の開発、(2)部材の軽量化を図るために強度、加工性等の最適機能傾斜を付与する機械部品鍛造技術(駆動部材の信頼性確保のための耐疲労破壊特性の向上を踏まえた)の開発を行う。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

技術目標及び達成時期

2011年度までに、高級鋼厚板(高強度鋼・極低温用鋼・耐熱鋼)の溶接を予熱・後熱なしに可能とする溶接技術と材料技術を開発するとともに、傾斜機能部材の鍛造技術を開発する。

研究開発期間

2007年度～2011年度

(6) 希少金属等高効率回収システム開発

概要

小型電子・電気機器にはベースメタルや、金、銀等の貴金属の他、インジウム、ニッケル等の希少金属等を含有している。現状では、これらの機器が廃棄された後は、非常に高温で処理する乾式製錬技術を用いてリサイクル・処理されているため、多大なエネルギーを消費するばかりか、回収可能な金属が銅、金、銀等に限定されており、その他の希少金属等は回収できずに廃棄処分されている。このため、湿式製錬技術を活用した高効率な最適技術の開発等を通じて、回収工程の省エネルギー及び希少金属等の回収率向上を図る。

技術目標及び達成時期

- ・ 従来方法(乾式製錬)で処理する場合に比べて、大幅な省エネルギーの実現(省エネルギー効果:原油換算で約78万kL/年削減)
- ・ 廃小型電子・電気機器、廃超硬工具等中に含まれる希少金属等の回収率の向上(インジウム0%→90%、ニッケル50%→95%、コバルト0%→95%、タンタル0%→80%、タングステン90%→95%、レアアース0%→80%)

研究開発期間

2007年度～2010年度

(7) 低品位鉱石・難処理鉱石に対応した革新的製錬プロセス技術の研究開発

概要

世界的な鉱石品位の低下、不要元素等の不純物の増加に対応するため、我が国非鉄金属業においては、低品位鉱石の利用拡大による我が国の鉱物資源の安定供給確保の強化が喫緊の課題となっているため、低品位・難処理鉱石の革新的な省エネルギー型の製錬プロセスを開発する。

技術目標及び達成時期

低品位鉱石及び難処理鉱石から効率的に銅等有用な非鉄金属を回収するため、低品位鉱石・難処理鉱石に対応した省エネルギー型プロセスによる新たな選鉱技術、製錬技術及び不純物対策技術の研究開発を行う。

(1) 高品位精鉱回収技術

低品位鉱石・難処理鉱石から高品位の精鉱を得る選鉱技術の開発。

ハンドリングが難しい極微細鉱等難処理鉱を処理する製錬技術の開発。

(2) 有用金属の抽出等回収技術

低品位精鉱から含有金属を高効率に回収する製錬技術の開発。

(3) 高濃度不純物の除去等対策技術

不要な元素(ヒ素、ビスマス、アンチモン等)等を多く含む精鉱からの不純物除去、分離、安定化等技術の開発。

上記要素技術を開発し、将来的にエネルギー消費原単位の悪化が予測される非鉄金属製錬について、省エネルギー見込み量、原油換算約2.6万KLを達成。

研究開発期間

2009年度～2012年度

(8) 環境調和型水循環技術開発

概要

我が国が強みを持つ、膜技術を始めとする水処理技術を強化し、省水型・環境調和型の水循環システムの開発に資する省エネ・省水型の要素技術を開発する。

技術目標及び達成時期

2013年度までに、以下の技術を開発する。

- 革新的膜分離技術の開発：

従来法に比べ膜透過加圧エネルギー等を50%以上削減。

- 省エネ型膜分離活性汚泥法（MBR）技術の開発：

従来法に比べ膜洗浄の曝気（空気気泡）エネルギー等を30%以上削減。

- 有用金属・有害物質の分離・回収技術の開発：

従来法に比べ汚泥の削減により汚泥処理・処分エネルギーを80%以上削減。

- 高効率難分解性物質分解技術の開発：

従来法に比べ窒素処理に係るエネルギーを50%以上削減。

オゾン酸化法等のエネルギーを50%以上削減。

研究開発期間

2009年度～2013年度

(9) 微生物機能を活用した環境調和型製造基盤技術開発

i) 微生物機能を活用した高度製造基盤技術開発（運営費交付金）

概要

エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものであり、省エネルギーかつ環境負荷が少ないといった特徴を有する微生物機能を活用した有用物質の革新的な生産プロセス（モノ作り）の技術を構築するため、産業用途に必要な機能既知遺伝子で構成されたゲノムを持ち、物質生産性向上につながる性能を備えた高性能宿主細胞の創製や、微生物反応の多様化・高機能化技術を開発するとともに、バイオマスを原料として有用物質を体系的かつ効率的に生産する（バイオリファイナリー）ための基盤技術を開発する。

技術目標及び達成時期

2010年度までに、物質生産性向上につながる性能を備えた高性能宿主細胞を創製するとともに、バイオプロセスの実用化適用範囲の拡大のための微生物反応の多様化・高機能化技術の開発を行う。バイオリファイナリー技術については、バイオマスを高効率で糖化し、糖から高効率で各種化成品の基幹物質を生産するバイオプロセス体系を構築する。

研究開発期間

2006年度～2010年度

ii) 微生物群のデザイン化による高効率型環境バイオ処理技術開発（運営費交付金）

概要

エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものであり、従来エネルギー多消費・廃棄物多排出型であった廃水・廃棄物処理において、微生物群の構成及び配置等を人為的に制御（デザイン化）することで、その処理効率を大幅に向上させ、省エネルギーで廃棄物も少ない高効率型廃水、廃棄物処理の基盤技術を確立する。

技術目標及び達成時期

2011年度までに、特定有用微生物群を人為的に安定導入・維持もしくは人為的に空間配置・優先化させる等のデザイン化技術を開発し、従来の廃水、廃棄物処理に比べより高効率で省エネルギーな処理技術を開発するとともに、実用化に資するための実証可能なテストプラント規模にて評価する。

研究開発期間

2007年度～2011年度

(10) 省エネルギー型化学技術創成研究開発補助事業

概要

化学企業が有する技術シーズの中で、省エネルギーのポテンシャルが大きいにもかかわらず民間だけで事業を進めるには開発リスクが大きいこと等がネックになって十分な研究開発費が投じられていない技術に対して、戦略的な研究開発支援を実施することにより、化学産業のみならず、各種最終製品や他産業において抜本的なエネルギー効率の改善を促進するものである。

技術的目標及び達成時期

2010年度までに、将来の発展が有望な技術に関する研究開発の実施とその実用化と普及を通し、化学産業のみならず他分野も含めた我が国省エネルギー対策への一層の寄与を目標とする。

研究開発期間

2004年度～2010年度

(11) エネルギー使用合理化繊維関連次世代技術開発

概要

製造エネルギーの低減を図ることができる革新的な繊維製品製造技術の開発や、使用することでエネルギー消費の低減が可能となる新たな繊維製品を開発。

技術的目標及び達成時期

2010年度までに、以下の開発を行う。

次世代資材用繊維の開発

ポリエチレンテレフタレート製造エネルギー低減技術の開発

研究開発期間

2005年度～2009年度

(12) 高効率ガスタービン実用化技術開発

概要

省エネルギー及びCO₂削減の観点から電力産業用高効率ガスタービンの実用化を目指し、大容量機(25万kW程度(コンバインド出力40万kW))の高効率化(52%~56%)のために1700級ガスタービンの実用化に必要な先端要素技術を適用した各要素モジュールの検証等を実施する。また、小中容量機(10万kW程度)の高効率化(45%~51%)のために有望とされている高湿分空気利用ガスタービンの実用化に必要な多段軸流圧縮機、多缶燃焼器等の開発を行うとともにシステムの信頼性等の検証を行う。

技術的目標及び達成時期

1700級ガスタービン実用化技術開発：先端要素技術を活用した燃焼器、タービン、圧縮機等各モジュールの検証等を行い、送電端熱効率56%以上の達成が可能なことを確認する。

高湿分空気利用ガスタービン実用化技術開発：2011年までに軸流圧縮機の3.5%(空気重量比)吸気噴霧冷却技術、低NO_x燃焼技術(運用負荷帯で10ppm以下)等を開発すると共に、実機に近い条件での要素機器の信頼性・耐久性を確認する。

研究開発期間

2008年度~2011年度

(13) エネルギー使用合理化高効率パルプ工程技术開発(運営費交付金)

概要

紙パルプ産業では、環境に関する自主行動計画に基づき、2010年度までに製品当たり化石エネルギー原単位を1990年度比13%削減し、CO₂排出原単位を10%削減することを目指し、紙パルプ工程における省エネルギー対策を着実に進めているものの、より一層の省エネルギー対策を進めるためには、技術開発によるブレークスルーが必要となっている。紙パルプ産業は、エネルギー多消費型産業のひとつであり、紙パルプ工程での省エネルギー対策は波及効果が大きいことから、紙パルプ工程におけるエネルギー使用合理化に資する技術開発を提案公募により実施する。

技術的目標及び達成時期

京都議定書の第1約束期間中、又は、第2約束期間中を目途として実用化に至るような技術開発を行うことで、京都議定書の第1約束期間の目標を着実に達成するとともに、現在、検討が行われている第2約束期間に向けた省エネルギー対策の更なる深化を進めていく。

研究開発期間

2005年度~2010年度

(14) 革新的省エネセラミックス製造技術開発(運営費交付金)

概要

小型炉設備で生産可能な小型セラミック中空ユニットを複数組みあわせること

で、これまでその製造が難しかった複雑な形状を持つ大型セラミックス部材を省エネで製作することができる革新的なセラミック部材製造技術を開発する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。
技術目標及び達成時期

2013年度までに、高機能化された小さな精密ブロックを立体的に組み上げ、高効率で接合、一体化をし、複雑な形状の部材や大型の部材を製造可能とする革新的なプロセス技術の基盤を確立し、高耐性部材、高温断熱部材及び高比剛性部材の試作を行う。

研究開発期間

2009年度～2013年度

- (15) 発電プラント用超高純度金属材料開発(運営費交付金)(4 - - 参照)
- (16) 先進超々臨界圧火力発電実用化要素技術開発(4 - - 参照)
- (17) 噴流床石炭ガス化発電プラント開発(4 - - 参照)
- (18) 石油精製高度機能融合技術開発(4 - - 参照)

4 - - . 時空を超えたエネルギー利用技術

(1) カーボンナノチューブキャパシタ開発プロジェクト(運営費交付金)

概要

高純度、高密度に配向した長尺の単層カーボンナノチューブの大量合成技術を開発するとともに、これを用いた従来よりも格段にパワー(電力)と蓄電量が大きなキャパシタを開発する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。
技術目標及び達成時期

2010年度までに、単層カーボンナノチューブの高度配向技術及び大量生産技術を確立するとともに、キャパシタ製造技術を確立することで、20Wh/Kgの高エネルギー密度と耐久性を有する電気二重層キャパシタを開発する。

研究開発期間

2006年度～2010年度

- (2) イットリウム系超電導電力機器技術開発(運営費交付金)(4 - - 参照)
- (3) 高温超電導電力ケーブル実証プロジェクト(運営費交付金)(4 - - 参照)
- (4) 固体高分子形燃料電池実用化戦略的技術開発(運営費交付金)(4 - - 参照)
- (5) 燃料電池先端科学研究(運営費交付金)(4 - - 参照)
- (6) 固体酸化物形燃料電池システム要素技術開発(運営費交付金)(4 - - 参照)
- (7) 水素貯蔵材料先端基礎研究事業(運営費交付金)(4 - - 参照)
- (8) 水素製造・輸送・貯蔵システム等技術開発(運営費交付金)(4 - - 参照)
- (9) 固体酸化物形燃料電池実証研究(運営費交付金)(4 - - 参照)
- (10) 大規模電力供給用太陽光発電システム安定化等実証事業(運営費交付金)(4 - - 参照)
- (11) 次世代蓄電システム実用化戦略的技術開発(運営費交付金)(4 - - 参照)
- (12) 革新型蓄電池先端科学基礎研究(運営費交付金)(4 - - 参照)

4 - - . 省エネ型情報生活空間創生技術

(1) グリーンITプロジェクト(運営費交付金)

概要

情報化社会の進展に伴うIT機器の消費電力の大幅な増大に対応し、抜本的な省エネを実現するため、サーバ、ネットワーク機器等の各装置の省エネに加え、省エネ型の巨大コンピューティング技術(グリーン・クラウドコンピューティング技術)、パワーエレクトロニクス技術を開発する。

技術目標及び達成時期

2012年度までに、IT機器・システムのエネルギー消費効率を2倍に向上させる基盤技術を開発する。

研究開発期間

2008年度～2012年度

(2) 次世代高効率ネットワークデバイス技術開発(運営費交付金)

概要

エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものであり、ネットワークで伝送されるデータ量の爆発的増加に伴い、関連機器の消費エネルギーが増大している中で、ネットワーク全体の消費電力量を抑制することが喫緊の課題であり、消費エネルギーの低減に大きく貢献するルータ・スイッチの高速化のための研究開発を実施するとともに、機器そのものの消費エネルギーを低減するための研究開発を実施する。

技術的目標及び達成時期

2011年度までに、1チャンネルあたり40Gbps超の通信速度に対応するトラフィック計測・分析・管理技術や40Gbpsのインターフェース、さらなる通信速度向上(100Gbps超)を実現するハードウェア技術、SFQ(単一磁束量子)スイッチに関する実現を可能とするための基盤技術を開発する。

研究開発期間

2007年度～2011年度

(3) 次世代大型低消費電力ディスプレイ基盤技術開発(運営費交付金)

概要

エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものであり、次世代の大型液晶及び大型プラズマディスプレイに関する低消費電力ディスプレイを実現するための研究開発を行う。

技術的目標及び達成時期

2011年度までに、液晶に関しては、高効率バックライト、革新的なTFTアレイプロセス技術・製造装置及び低消費電力型の画像処理エンジン等に係る技術を確立する。また、プラズマディスプレイに関しては、超低電圧駆動等に係る技術を確立する。

研究開発期間

2007年度～2011年度

(4) 有機発光機構を用いた高効率照明の開発 (運営費交付金)

概要

エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものであり、蛍光灯に代わる高効率照明として有機EL発光機構を用いるための技術開発課題(発光効率、演色性、面均一性、生産コスト)等を明らかにし、それをブレイクスルーする技術シーズを抽出する。

技術目標及び達成時期

2009年までに現在一般に普及している蛍光灯照明に代わる高効率照明としての必要スペックを達成するとともに、次世代照明として同じく期待されているLEDとの差別化要素を技術的に達成し、大面積/高スループット/低コストで量産するプロセス技術を開発する。また、現在蛍光灯の間接・拡散照明が用いられている照明機器を代替する有機EL照明を実用的なコストで製造できる技術を確立する。

研究開発期間

2007年度～2009年度

(5) マルチセラミックス膜新断熱材料の開発 (運営費交付金)

概要

住宅やビルなどの冷暖房における大幅な省エネを実現する画期的な断熱性能を持つ壁および窓材料を、セラミックスのナノ多孔体構造やポリマー複合化構造などからなるマルチセラミックス膜アセンブリ技術によって開発する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

技術目標及び達成時期

2011年度までに、熱貫流率(熱の伝わりやすさ)が $0.3\text{ W/m}^2\text{ K}$ 以下、壁厚さ10mm程度の超断熱壁材料および熱貫流率が $0.4\text{ W/m}^2\text{ K}$ 以下、光(可視光)透過率が65%以上(Low-Eガラス使用)、ヘイズ率が1%以下の超断熱窓材料を実現する。

研究開発期間

2007年度～2011年度

(6) 超フレキシブルディスプレイ部材技術開発 (運営費交付金)

概要

製造工程等の省エネルギー化を実現するために行う。従来、表示デバイスの製造には、真空蒸着と高温下での焼成と、それに伴う排ガス排水処理が必須であった。これを、ロールtoロール方式に代替することで常圧、常温下での製造を実現し、フレキシブルな薄型ディスプレイを製造する。そのために、有機TFT材料およびコンタクトプリント技術等を開発する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

技術的目標及び達成時期

2009年度までに、実用化に向けた実証のための巻き取り方式ディスプレイのプロトタイプを試作する。またフレキシブルデバイス材料開発に貢献する部材ならびに薄膜複合化技術を開発し、これらをパネル化するための実用化技術を確立する。

研究開発期間

2006年度～2009年度

(7) 低損失オプティカル新機能部材技術開発（運営費交付金）

概要

近接場光の原理・効果を応用した低損失オプティカル新機能部材技術を開発し、実用化の目処を得ることを目的とする。動作原理に近接場光を用いるオプティカル新機能部材は、従来の材料特性のみに依存した光学部品では不可能な機能・性能を発揮し、液晶プロジェクター・液晶ディスプレイなど情報家電の省エネルギー、高性能・高信頼化を図る上でのキーデバイスとなることが期待できる。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

技術目標及び達成時期

2010年度までに、共通基盤技術として、ナノ構造部材の設計・作製・評価技術を開発するとともに、ナノ構造部材に発現する近接場光の機能を動作原理とする低損失オプティカル新機能部材を検討し機能を確認する。

研究開発期間

2006年度～2010年度

(8) 次世代光波制御材料・素子化技術（運営費交付金）

概要

ガラス材料に関する精密モールド技術を確立し、機能性の高い光波制御素子を低コストで生産できるプロセス技術を開発することで部材の小型化・高機能化を図りつつ、省エネを実現する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

技術目標及び達成時期

2010年度までにサブ波長レベルの微細構造をガラス表面にモールド成形する技術を実現し、実装可能な具体的なデバイスを作製する。

研究開発期間

2006年度～2010年度

(9) 次世代高効率エネルギー利用型住宅システム技術開発・実証事業

（運営費交付金）

概要

ゼロ・エミッションハウスによる生活の大幅な省エネの実現に向け、家屋内直流配電システムや、電力需給の状態に応じた太陽電池等の分散型電源の制御、電力ネットワークを活用した家電の制御等、住宅全体としてエネルギーの最適制御

を行うシステムの開発・実証を行う。

技術的目標及び達成時期

2011年度までに、直流給電・配電に関する規格の標準化、直流配電の電流・電圧の規格化、蓄電池設置に係る安全規制の改正に対する提案が可能となる技術を確立する。

研究開発期間

2009年度～2011年度

4 - - . 先進交通社会確立技術

(1) エネルギーITS (運営費交付金)

概要

平成19年5月の「次世代自動車・燃料イニシアティブ」に基づき、運輸部門のエネルギー消費効率改善のため、自動運転・隊列走行技術、高度交通流制御技術等の省エネルギーに資するITS技術の開発を行う。

技術的目標及び達成時期

2012年度までにCO2削減効果評価方法の確立を図るとともに、2020年代に実用化が見通せる運転制御、隊列走行の基盤技術の確立を目指す。

研究開発期間

2008年度～2012年度

(2) サステナブルハイパーコンポジット技術の開発 (運営費交付金)

概要

炭素繊維複合材料は、軽量、高強度等の優れた特性を有している。従来の熱硬化性樹脂を用いた炭素繊維複合材料では成形性・加工性に乏しくリサイクルが困難であったため、熱可塑性樹脂を用いた炭素繊維複合材料(CFRTP)の開発を行う。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

技術目標及び達成時期

2012年度までに、炭素繊維と熱可塑性樹脂との中間基材を開発し、高速成形技術、接合技術及びリサイクル技術を開発する。

研究開発期間

2008年度～2012年度

(3) 次世代構造部材創製・加工技術開発 (次世代航空機用)

概要

エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものであり、航空機、高速車両等の輸送機器への先進材料の本格導入を加速させるため、先進複合材料及び先進金属材料について部材開発、設計試作及び評価を実施することで、軽量化によりエネルギー使用効率を大幅に向上させる革新的な構造部材の創製・加工技術の開発を行う。

技術目標及び達成時期

2012年度までに、複合材の構造健全性診断技術、チタン合金の創製・加工技術を確立するとともに、航空機用エンジンへの適用を目指し、耐熱・耐衝撃性に優れた複合材料を開発する。

研究開発期間

2003年度～2012年度

(4) 環境適応型小型航空機用エンジン研究開発(運営費交付金)

概要

エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものであり、エネルギー使用効率を大幅に向上し、環境対策にも優れた次世代の小型航空機用エンジンの開発にとって重要な要素技術の研究開発を行う。

技術目標及び達成時期

2010年度までに、エネルギー使用効率を大幅に向上する構造設計技術、騒音、NOx等の環境負荷対応に優れた環境対策技術、インテグレーション技術、高バイパス比化等の高性能化技術といった要素技術の研究開発・実証を行う。

研究開発期間

2003年度～2010年度

(5) 省エネ用炭素繊維複合材技術開発

概要

航空機、自動車、鉄道、船舶等の輸送機械等における炭素繊維複合材の適用範囲を拡大し、省エネルギーの促進を図るため、先進的な炭素繊維複合材成形技術や、耐雷対策の容易化技術等の研究開発・実証を行う。

技術目標及び達成時期

2013年度までに、従来の方法に比べ、曲率の大きな部位の成形も行うことができるVaRTM(バータム)法等の炭素繊維複合材成形技術や、炭素繊維複合材を用いた製品の耐雷性能を容易に確保する技術の研究開発・実証を行う。

研究開発期間

2008年度～2013年度

(6) 燃料電池システム等実証研究(運営費交付金)(4 - - 参照)

(7) 次世代蓄電システム実用化戦略的技術開発(運営費交付金)(4 - - 参照)

4 - - . 次世代省エネデバイス技術

(1) ナノエレクトロニクス半導体新材料・新構造技術開発 - うち窒化物系化合物半導体基板・エピタキシャル成長技術の開発(運営費交付金)

概要

窒化物系化合物半導体は、パワーデバイス、高周波デバイス、発光デバイス等、重要なデバイスの飛躍的な性能向上と消費電力削減への貢献を期待されている。このため、従来の半導体材料では実現出来ない領域で動作可能なハイパワー・超

高効率の電子素子、超高速電子素子等の作成に必要な窒化物系化合物半導体先進技術の国際競争力を強化すべく、高品質かつ大口径単結晶基板、高品質かつ大口径エピタキシャル成長技術等の開発を行う。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。
技術目標及び達成時期

2011年度までに、次世代窒化物系半導体デバイスを実現する以下結晶作製技術を開発する。

1) 基板技術 (GaN、AlNバルク結晶作製技術)

・口径2～4インチで高品質エピ成膜を可能とする低コストの単結晶基板作製技術の確立。

2) エピ技術 (エピタキシャル成膜及び計測評価技術)

・低欠陥高品質エピ層を実現する成膜技術及び膜成長過程を計測評価する技術の確立。

・高出力かつ高安定動作可能なエピ層の実現

・高耐圧超高速な新しいデバイス構造の開発

研究開発期間

2007年度～2011年度

(2) 次世代低消費電力半導体基盤技術開発 (MIRAI) (運営費交付金)

概要

エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものであり、IT化の進展、IT利活用の高度化を支え、あらゆる機器に組み込まれている半導体の低消費電力化を図るため、テクノロジーノード(微細化レベル)45nm以細の次世代低消費電力半導体を実現するため、微細加工の基盤技術やマスク(半導体素子製造過程で用いる原板)の低コスト化・製造時間短縮に必要な基盤技術の開発等を行う。

技術目標及び達成時期

2010年度までに、マスク設計・描画・検査の各工程に共通的なマスクデータ処理技術、繰り返しパターンやパターン重要度を利用した描画・検査高速化技術等の基本的な開発及びEUVLマスク基盤技術として、許容欠陥の指標明確化、ブランクス位相欠陥検査技術の確立等を完了する。

研究開発期間

2001年度～2010年度

(3) 半導体アプリケーションチッププロジェクト (運営費交付金)

概要

エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものであり、情報通信機器、特に、情報家電(車載を含む)の低消費電力化を実現できる半導体アプリケーションチップ技術の開発を行う。

技術目標及び達成時期

2009年度までに情報家電の低消費電力化を実現できるアプリケーションチ

ップ技術を開発する。

研究開発期間

2003年度～2009年度

(4) 次世代プロセスフレンドリー設計技術開発(運営費交付金)

概要

エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものであり、あらゆる機器に組み込まれている半導体の低消費電力化を図るため、テクノロジーノード45nm以細の半導体に対応するSoC(System on Chip)設計技術を開発する。具体的には、テクノロジーノード45nm以細の半導体の共通設計基盤技術開発として、DFM(Design For Manufacturing)基盤技術を中核とした設計及び製造の全体最適を確保する全く新しいSoC製造フローを開発する。

技術目標及び達成時期

テクノロジーノード45nm以細のSoC開発において製造性を考慮した共通設計基盤技術を確立し、システムLSIデバイスの省エネルギーを実現するとともに、設計生産性を従来予想に比べ2倍にすることを目標とする。

研究開発期間

2006年度～2010年度

(5) 半導体機能性材料の高度評価基盤開発(運営費交付金)

概要

情報通信機器の高機能化や低消費電力化等の要求を満たす半導体集積回路を実現するため、新たな機能性材料開発に貢献する評価基盤技術を開発し、さらに開発した機能性材料の半導体及び半導体集積回路への適用を可能とする統合的なソリューション技術を開発する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

技術的目標及び達成時期

2011年度までに、半導体デバイス性能に直結する接合素子の性能性及び信頼性等、半導体製造プロセス全体を俯瞰しつつ、機能性材料開発が可能となる評価基盤技術を開発し、開発した機能性材料を用いた統合的なソリューションが提案できる材料評価基盤を構築する。

研究開発期間

2009年度～2011年度

4 - - . その他

(1) 次世代構造部材創製・加工技術開発(次世代衛星基盤)

概要

国際商業市場における我が国衛星メーカーの競争力を強化するべく、準天頂衛星システム(利用者に対し、米国が運用するGPSとの補完による高精度な位置情報等の提供を可能にするシステム)の構築に不可欠な基盤技術(産業競争力強

化にも直結する衛星の軽量化、長寿命化に関する技術等)の開発を行う。本プロジェクトの一部については、他部門と比較して需要増加の割合が高い運輸部門のエネルギー消費を抑制すべく、自動車、高速車両等の輸送機器の軽量化・効率化にも資する複合材料製造設計等の基盤技術を確立するためのものであり、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

静止軌道と一定の角度をなす傾斜軌道に複数の衛星を配置し、見かけ上、常に天頂付近に最低1つの衛星を位置させるシステム。

技術目標及び達成時期

2010年度までに、準天頂衛星システムの構築に不可欠な基盤技術(産業競争力強化にも直結する衛星の軽量化、長寿命化に関する技術等)の開発を実施し、宇宙空間での技術実証を行う。

研究開発期間

2003年度～2010年度

4 - . 運輸部門の燃料多様化

4 - - . 共通

- (1) 新エネルギー技術実用化補助事業(運営費交付金)(4 - - 参照)
- (2) 非化石エネルギー産業技術研究助成事業(運営費交付金)(4 - - 参照)

4 - - . バイオマス由来燃料

- (1) 新エネルギー技術研究開発(運営費交付金)(4 - - 参照)
- (2) E3地域流通スタンダードモデル(運営費交付金)(4 - - 参照)
- (3) バイオマス等未活用エネルギー実証事業(運営費交付金)(4 - - 参照)
- (4) バイオマスエネルギー地域システム化実験事業(運営費交付金)(4 - - 参照)
- (5) セルロース系エタノール革新的生産システム開発(運営費交付金)(4 - - 参照)

4 - - . G T L 等の合成液体燃料

- (1) 天然ガスの液体燃料化(G T L)技術実証研究(運営費交付金)(4 - - 参照)

4 - - . 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(運営費交付金)(4 - - 参照)
- (2) 燃料電池先端科学研究(運営費交付金)(4 - - 参照)
- (3) 水素製造・輸送・貯蔵システム等技術開発(運営費交付金)(4 - - 参照)
- (4) 水素貯蔵材料先端基盤研究事業(運営費交付金)(4 - - 参照)
- (5) 水素社会構築共通基盤整備事業(運営費交付金)(4 - - 参照)
- (6) 燃料電池システム等実証研究(運営費交付金)(4 - - 参照)

4 - - . 電気自動車

- (1) 次世代蓄電システム実用化戦略的技術開発(運営費交付金)(4 - - 参照)
- (2) 革新型蓄電池先端科学基礎研究(運営費交付金)(4 - - 参照)

4 - . 新エネルギー等の開発・導入促進

4 - - . 共通

(1) 新エネルギー技術研究開発(運営費交付金)

概要

新エネルギーの自立的普及に向けて、太陽光、風力、バイオマスなど新エネルギー分野でのイノベーションを促進すべく、高効率かつ低コストを目指した先進的技術開発を実施する。具体的には以下の研究開発を実施する。

- A. 革新的な太陽電池の開発を実施する研究拠点を形成し、海外との研究協力等を行いながら、超長期の視野に立って、飛躍的な性能向上を目指した太陽光発電技術の開発を推進する。(革新型太陽電池国際研究拠点整備事業)
- B. 中長期的に、より一層の高効率化と低コスト化を目指して、革新的な材料、構造等を採用した太陽光発電技術の開発を推進する。(太陽光発電システム未来技術研究開発)
- C. 2020年の目標発電コスト14円/kWhおよび太陽光発電システムの大幅な効率向上を実現すべく、未来技術研究開発などで得られた要素技術開発の成果の内、実用化が期待できる太陽電池作製に係る技術について課題を設定し早期実用化を助成する。(太陽光発電システム実用化促進技術開発)
- D. 電力供給源としての太陽光発電の信頼性を確立し、今後の太陽光発電システムの円滑な普及促進を図るため、太陽光発電システムの大量普及時に不可欠な性能評価技術やリサイクル・リユース技術等システムの共通基盤技術に係る研究等を実施する。(太陽光発電システム共通基盤技術研究開発)
- E. PVシステムの普及拡大のため、「集中連系型太陽光発電システム実証研究」の設備を有効利用しながら、認証制度にも資する複数台連系に係わる試験方法を確立する。(単独運転検出装置の複数台連系試験技術開発研究)
- F. 風力発電技術の国際的な動向を把握しつつ、我が国の複雑地形における風力発電利用上の各種課題を克服するための基礎から応用までの技術について研究開発を行う。具体的には我が国の厳しい風特性を反映した風特性モデルの確立及び高々度風況観測を簡便に行うためのリモートセンシング技術の精度検証・評価を行う。

また、全国規模での落雷電流計測、落雷様相観測による雷特性の把握、落雷特性・落雷保護対策と被害実態との相関把握、上記を踏まえた効果的な落雷保護対策の検討及び実機規模での実雷による保護対策検証等を実施し、高精度落雷リスクマップを作成するとともに、風力発電設備へのより効果的な落雷等に対する対策を策定する。(次世代風力発電技術研究開発事業)
- G. 我が国特有の海上特性や気象・海象条件を把握し、これらの自然条件に適した洋上風況観測法や風力発電システムに関する技術開発とその実証を行なうと共に、環境影響評価システム手法を確立する。(洋上風力発電技術研究開発)
- H. バイオマスのエネルギー利用の促進を図るためには、発生地域が分散し、形状・性状が多種多様にわたるバイオマス資源を利用しやすい形態の有用エネルギーへ効率的に転換できる技術を開発する。(バイオマスエネルギー等高効率転換技術開発)

I .世界的にもベンチャー企業による太陽光発電、新型風力発電、燃料電池、バイオ燃料分野におけるイノベーション活動が活発化していることを踏まえ、詳細目標設定・多段階選抜形の米国S B I R制度を参考に特定のキーテクノロジーに対するベンチャーのチャレンジを強力に支援する。(新エネルギーベンチャー技術革新事業)

技術目標及び達成時期

- A . 2050年までに「変換効率が40%超」かつ「発電コストが汎用電力料金並み(7円/kWh)」の太陽電池を実用化することを目指した研究開発の中で、変換効率40%超の実現に向けた技術の基礎・探索研究段階と位置づけて研究開発を実施する。
- B . 2020年頃に業務用電力料金並の発電コスト(14円/kWh、モジュール製造原価として75円/W程度)、2030年頃に火力発電の発電コスト(7円/kWh、モジュール製造原価として50円/W程度)の実現に向けた中・長期的な技術開発を行う。
- C . 2015年に向けて市場競争力を備えた本格生産・商用化を目指す。
- D . 2020年度の技術開発目標である発電コスト14円/kWhを目指し、中期的な視点での太陽光発電の普及拡大に資する。
- E . 2009年度末までに、電力系統側が受け入れ可能な、導入台数の制限のない能動型単独運転検出装置の試験方法を確立する。
- F . 2012年度までに、風力発電の基礎から応用までの技術について、国際的な動向を把握しつつ、我が国特有の気象・地形に起因する各種問題(風車耐久性等)を克服するための研究開発を行って、我が国の風車産業の振興に資するとともに、IEA RD&D WINDなどの最先端の国際的風力発電共同研究に研究成果を反映させる。
- また、2012年度までに、高精度落雷リスクマップを作成するとともに、風力発電設備へのより効果的な落雷等に対する対策を策定する。
- G . 2013年度までに、我が国の海象・気象条件に適した、洋上風況観測システム、洋上風力発電システム及び環境影響評価の手法等の技術を確立する。
- H . 2004年度より、バイオマスエネルギー転換プロセスにおける各工程のボトルネックを抽出し、2008年度までに開発が完了するよう、それぞれのボトルネックをブレイクスルーする要素技術開発を提案公募方式により実施する。更に、2005年度より2009年度まで、バイオマスのエネルギー転換・利用技術等の分野において2030年の普及を目指した新規な革新的技術を発掘するための先導技術研究開発を提案公募方式により実施する。
- I .潜在的なオプションの顕在化や関連産業分野の技術開発による技術革新により、新エネルギー導入促進技術オプションの多様化と経済性の向上に寄与する。

研究開発期間

2007年度～2011年度

(2) 新エネルギー技術フィールドテスト事業(運営費交付金)

概要

2010年度の新エネルギー導入目標達成に向け、新技術を活用した太陽光発電及び太陽熱利用システムの有効性の検証、バイオマス熱利用システムの性能・経済性等の検証、風車立地に必要な高所の風況データの収集・解析など総合的な新エネルギーフィールドテストを実施する。具体的には以下のフィールドテストを実施する。

- A. 新技術を活用した太陽光発電システム等を設置し、出力特性等の情報収集及び分析を行うことで、その有効性を確認するとともに、ガイドラインの策定等により広く情報発信を行う。(太陽光発電新技術等フィールドテスト事業)
- B. 新利用形態の太陽熱利用システムや未利用分野においてシステムを設置し、出力特性等の情報収集及び分析を行うことで、その有効性を確認するとともに、ガイドラインの策定等により広く情報発信を行う。(太陽熱高度利用システムフィールドテスト事業)
- C. 広く薄く賦存するバイオマスを、民間企業や研究機関等において研究開発が終了段階をむかえた高効率に熱利用できるシステムを設置し、設置場所の熱需要に合わせたフィールドテストを実施することにより、実運転におけるバイオマス熱利用転換システムとしての課題抽出、解決を行い、早期実用化を図り、バイオマスエネルギーの導入促進を行う。(地域バイオマス熱利用フィールドテスト事業)
- D. 風力発電の導入目標(2010年度300万kW)を達成するため、共同研究事業者と大型風車の導入普及に必要な高所の風況データの収集・解析・評価を行い、公開する。(風力発電フィールドテスト事業)

技術目標及び達成時期

- A. 設置システムについて、2007年度に策定したガイドラインを2009年度、2012年度及び2015年度に見直し改訂する。
- B. 設置システムについて、2007年度に策定したガイドラインを2009年度に改訂する。また、2012年度及び2015年度に見直し改訂する。
- C. 一定レベルまで確立されたバイオマス熱利用技術について、性能や経済性等の状況・データを収集・分析し、熱利用システムの有効性を実証するとともに、これらの結果を公表することで汎用性の高い熱利用システムの確立し、2010年度のバイオマス熱利用の導入目標(308万KL)達成を目指す
- D. 2010年度までに、高所の風況データの解析・評価を行い、導入普及に有用な資料の取りまとめを行い、これらの結果を風力発電事業者、研究機関や風力発電事業を計画している各種団体等に公開することにより、風力発電導入の素地を形成し、風力発電の導入を拡大する。

研究開発期間

2007年度～2011年度

(3) 新エネルギー技術実用化補助金(運営費交付金)

概要

科学技術基本計画における戦略的技術領域・課題にかかる技術課題等で石油代替エネルギーの製造・生成・利用に資する実用化開発を行う民間企業に対し助成支援する。

技術目標及び達成時期

助成事業終了後3年以上を経過した時点で25%の実用化達成率。加えて、知的資産経営の方針に対する審査時の評価を通じて、「技術等の知的資産を活かす経営の下で収益拡大を図る(技術を経営、収益につなげる)」意識を普及させる。

研究開発期間

2000年度～

(4) 非化石エネルギー産業技術研究助成事業(運営費交付金)

概要

産業界や社会のニーズに応える石油代替技術のシーズの発掘とその育成、並びに、石油代替技術に関する次世代の研究リーダーの育成を図る。この目的のため、産業界からの期待が高い技術領域・課題を提示した上で、大学や独立行政法人の若手研究者等から研究開発テーマを募集する。厳正な外部評価によって石油代替効果があり且つ独創的・革新的なテーマを選定し、研究者代表者個人を特定して助成金を交付する。

技術目標及び達成時期

独創性のある若手研究者等を助成すると共に、中間評価ゲート方式が醸成する競争的環境の下で企業との連携を強化させることにより、10～15年後の実用化が有望な革新的石油代替技術の研究開発を促進する。本事業では革新的石油代替技術の実用化への第1歩となる特許について、助成期間終了後の出願比率を100%とすることを目標とするとともに、石油代替技術に関する次世代の研究リーダーの育成を図る。

研究開発期間

2000年度～

4 - - . 太陽・風力

(1) 太陽光発電無線送受電技術の研究開発

概要

将来の新エネルギーシステムとして期待される宇宙太陽光発電システム(SSPS)の中核的技術として応用可能なマイクロ波による太陽光発電無線送受電技術の確立に向け、安全性や効率性等の確保に不可欠な精密ビーム制御技術の研究開発を行う。

技術目標及び達成時期

2012年度までに複数のフェーズドアレイパネル間の位相同期を行い、パイロット信号の方向にマイクロ波を電送するレトロディレクティブ技術を活用した精密ビーム制御技術の確立を目指す。

研究開発期間

2008年度～2012年度

4 - - . 電力系統制御・電力貯蔵

(1) 革新型蓄電池先端科学基礎研究(運営費交付金)

概要

電池の基礎的な反応原理・反応メカニズムを解明することで、既存の蓄電池の性能向上及び革新型蓄電との実現に向けた基礎技術の確立を目指す。

技術目標及び達成時期

世界最高レベルの放射光施設を用いた評価装置により、蓄電池の反応メカニズムを解明するとともに、2030年に電気自動車の航続距離500km、コスト1/40を実現すべく、新材料の開発を行う。

研究開発期間

2009年度～2015年度

(2) 次世代蓄電システム実用化戦略的技術開発(運営費交付金)(4 - - 参照)

(3) 大規模電力供給用太陽光発電システム安定化等実証事業(運営費交付金)(4 - - 参照)

4 - - . バイオマス・廃棄物・地熱等

(1) E3地域流通スタンダードモデル創成事業(運営費交付金)

概要

離島(全域)におけるエタノール3%混合ガソリン(E3)の製造から給油までの大規模なフィールドテストを通じ、E3利用に関する社会システムモデルの構築と一般社会へ適用する際の技術課題の抽出を行う。

技術目標及び達成時期

2010年の「京都議定書目標達成計画」の導入目標(50万kl)に資するため、2009年度にE3利用の社会モデルを構築し、2011年度までにその検証を行う。

研究開発期間

2007年度～2011年度

(2) バイオマス等未活用エネルギー実証事業(運営費交付金)

概要

地域に賦存する未活用な資源であるバイオマスをエネルギーとして有効活用するため、溶融ガス化等熱化学的変換技術による燃料化システムやメタンガス等生物化学的変換技術による燃料化システム等の実証試験事業、事業可能性調査等を実施し、利用ノウハウ等を蓄積、本格的なバイオマス等エネルギーの導入を推進する。

技術目標及び達成時期

2009年度までに、バイオマス等の種別やエネルギー変換手法、更には地域

特性を加味した一連のエネルギー転換システム毎のフィージビリティスタディや試験設備の設置により、バイオマス等の運搬・収集、エネルギー転換及びエネルギー利用に係るデータの収集、分析、評価を実施し、その結果をフィードバックすることによって本格的なバイオマス等エネルギーの導入を目指す。

研究開発期間

2001年度～2009年度

(3) バイオマスエネルギー地域システム化実験事業（運営費交付金）

概要

バイオマスエネルギーの資源収集・運搬、転換、残渣処理、利用までの一連の利活用システムについての、各要素の連携の最適化を図るための実証を実施することによって、地域特性に適合した地域主導によるバイオマスの地産地消・地域循環型の先導的モデルシステムを構築することによりバイオマスエネルギーの導入を促進する。

技術目標及び達成時期

2009年度までに、国内バイオマス資源の安定的かつ経済的な供給システム、最適なエネルギー転換技術、エネルギー転換後に発生する残渣の処理等の一連の地産地消型エネルギー転換システムについて、ノウハウ蓄積、課題抽出及びその対策方法の策定、技術確立を行う。また、ここで確立されたバイオマスエネルギーシステムは他地域への波及を先導する事例となることを目標とする。

研究開発期間

2005年度～2009年度

(4) セルロース系エタノール革新的生産システム開発（運営費交付金）

概要

大規模安定供給が可能で、かつ食料と競合しない、草本系、木質系のセルロース系バイオマス原料の栽培からバイオエタノール製造までの一貫生産システムを構築し、環境負荷、経済性等を評価する。加えて、大規模生産に当たり危惧されている、生態系破壊、森林破壊、ライフサイクルでの環境負荷増大等の負の影響についての適切な評価、認証等、持続可能なバイオ燃料の生産拡大を担保する社会システム整備のあり方についても調査研究を行う。

技術目標及び達成時期

2015年までに、製造コスト40円/L以下、エネルギー回収率35%以上を達成するための技術開発を行う。

研究開発期間

2009年度～2013年度

4 - - . 燃料電池

(1) 固体高分子形燃料電池実用化戦略的技術開発(運営費交付金)

概要

自動車用、家庭・業務用等に利用される固体高分子形燃料電池(PEFC)の実用化・普及に向け、要素技術、システム化技術及び次世代技術等の開発を行うとともに、共通的な課題解決に向けた研究開発の体制の構築を図る。

技術目標及び達成時期

2009年度までに、固体高分子形燃料電池の経済性・耐久性の向上や高性能化のための技術開発を行い、燃料電池の普及段階へ向けて必要な基本的技術を確立する。

研究開発期間

2005年度～2009年度

(2) 燃料電池先端科学研究(運営費交付金)

概要

燃料電池の基本的反応メカニズムについての根本的な理解を深めるために、高度な科学的知見を要する現象解析及びそのための研究体制の整備を行い、現状の技術開発における壁を打破するための知見を蓄積する。

技術目標及び達成時期

2009年度までに、燃料電池内における反応機構を電気化学(電極触媒反応、イオン移動、分子移動等)及び材料化学(溶解・腐食反応、錯形成反応、ラジカル反応、固相内拡散等)の観点から解明する。また、燃料電池新技術の性能を適切に評価・実証するための基本システムを構築する。

研究開発期間

2005年度～2009年度

(3) 固体酸化物形燃料電池システム要素技術開発(運営費交付金)

概要

固体酸化物形燃料電池(SOFC)は発電効率が高く、分散型電源として期待されるが、実用化・普及のためには耐久性・信頼性向上、低コスト化等の課題を解決することが必要であり、材料開発や劣化要因解明など基盤的な要素技術の研究を行う。

技術目標及び達成時期

2012年度までに、耐久性・信頼性の向上のための劣化要因解明等の基礎研究、低コスト化のための材料等や高出力セルスタックの開発、起動停止対応等の実用性向上のための技術開発を実施する。

研究開発期間

2008年度～2012年度

(4) セラミックリアクター開発（運営費交付金）

概要

低温域かつ高効率なエネルギー変換を可能とする次世代型セラミックリアクターの実現のため、世界最高効率の燃料電池マイクロセルの集積構造技術等の開発を行う。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

技術目標及び達成時期

2009年度までに、新電解質材料の適用や電極反応の高効率化等による、低温作動時（650以下）での出力性能を向上させる材料技術と共に、マイクロセルの集積構造化や精緻なインターフェース構築のための製造プロセス技術を開発。そして、これらの技術を統合することにより、次世代型セラミックリアクターとしてのプロトタイプモジュール実証（出力性能2kW/L等）を行う。

研究開発期間

2005年度～2009年度

(5) 水素製造・輸送・貯蔵システム等技術開発（運営費交付金）

概要

水素の製造・輸送・貯蔵等に係る機器やシステムについて、性能・信頼性・耐久性の向上や低コスト化を目指す水素利用技術の研究開発を行い、水素社会の実現に必要な基盤技術の確立を図る。

技術目標及び達成時期

2012年度までに、水素製造・貯蔵・輸送・充填に関する機器やシステムの信頼性・耐久性向上、低コスト化、性能向上等実用化検証や要素技術開発、及び当該技術を飛躍的に進展させることができる革新的技術開発や調査研究などを行い、その成果を産業界に提供することにより、水素エネルギー初期導入間近の関連機器製造・普及技術として完成させ、水素社会の真の実現に必要な基盤技術の確立を図る。

研究開発期間

2008年度～2012年度

(6) 水素貯蔵材料先端基盤研究事業（運営費交付金）

概要

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。

技術目標及び達成時期

2011年度までに、水素貯蔵材料の基本原則、さらには水素貯蔵能力の革新的向上に必要な条件を明らかにすることにより、水素をより安全・簡便・効率的かつ低コストに輸送・貯蔵するための技術基盤を確立する。

研究開発期間

2007年度～2011年度

(7) 水素先端科学基礎研究事業（運営費交付金）

概要

水素の輸送や貯蔵に必須な材料に関し、水素脆化等の基本原理の解明及び対策の検討を中心とした高度な科学的知見を要する先端的研究を、国内外の研究者を結集し行うことにより、水素をより安全・簡便に利用するための技術基盤を確立する。

技術目標及び達成時期

2012年度までに、水素脆化、水素トライボロジーの基本原理の解明及び対策の検討等を行い、水素をより安全・簡便に利用するための技術指針を産業界に提供する。

研究開発期間

2006年度～2012年度

(8) 水素社会構築共通基盤整備事業（運営費交付金）

概要

燃料電池の導入・普及に資する基盤整備のため、製品性能の試験・評価手法及び国内外の基準・標準の確立を図る。

技術目標及び達成時期

2009年度を目途に、安全性等に係るデータを取得し、そのデータを基に試験・評価手法の確立、国際標準の確立、規制の再点検を三位一体で進める。

研究開発期間

2005年度～2009年度

(9) 固体酸化物形燃料電池実証研究（運営費交付金）

概要

発電効率が高く、分散型電源として期待される固体酸化物形燃料電池（SOFC）の研究開発・実用化の促進のため、耐久性を始めとしたデータの取得・課題抽出等のための実証を実施する。

技術目標及び達成時期

2010年度までに、SOFCシステムの実証試験を数十～数百台規模で実施し、蓄積が不足している耐久性を始めとした実証データの取得・課題抽出等を行い、SOFC技術開発等へのフィードバックを行う。

研究開発期間

2007年度～2010年度

(10) 燃料電池システム等実証研究(運営費交付金)

概要

実条件に近い中での燃料電池自動車等の実証走行や、高圧水素貯蔵システム、多角的な燃料供給システムの検証を進め、水素エネルギー社会における水素利用の課題等を抽出するとともに、燃料電池・水素に対する国民的理解の醸成を図る。

技術目標及び達成時期

2010年度までに、実使用条件下における技術的課題を抽出するとともに、環境特性、エネルギー総合効率、安全性、耐久性等に関する基準・標準に資するデータを取得し、燃料電池自動車、水素ステーションの研究開発等へのフィードバックを行う。

研究開発期間

2006年度～2010年度

(11) 将来型燃料高度利用技術開発(4 - - 参照)

4 - . 原子力等利用の推進とその大前提となる安全の確保

4 - - . 軽水炉・軽水炉核燃料サイクル

< 新型軽水炉 >

(1) 次世代軽水炉等技術開発

概要

2030年前後に見込まれる大規模な代替炉建設需要に対応するため、安全性・経済性、信頼性等に優れ、世界標準を獲得し得る次世代軽水炉の技術開発を行う

技術目標及び達成時期

2010年度までに、次世代軽水炉の実現に必要な要素技術開発等及びプラント概念の成立性について見通しを得るための概念設計検討を行う。

研究開発期間

2008年度～2010年度(見直し)

< 軽水炉使用済燃料再処理技術の高度化 >

(2) 使用済燃料再処理事業高度化

概要

再処理施設で用いられるガラス固化技術について、より多くの白金族元素等を含む高レベル廃液を溶融可能な新しい性状のガラスを開発するとともに、これに対応しうる新型の溶融炉を開発することにより、我が国の使用済燃料再処理技術の高度化を図る。新型ガラス溶融炉の開発に際しては、六ヶ所再処理工場の運転経験を反映する研究もあわせ行う。

技術目標及び達成時期

より多くの白金族元素等を含む高レベル廃液を溶融可能なガラス及び溶融炉の開発等によって、より高品質のガラス固化体を製造可能なガラス固化技術を開発する。

また、本事業によって開発されたガラス固化技術を、5年程度で更新が計画されている日本原燃株式会社六ヶ所再処理工場のガラス溶融炉及び同工場のガラス固化施設の運転に反映させる。

研究開発期間

2009年度～2011年度

< プルサーマルの推進 >

(3) 全炉心混合酸化物燃料原子炉施設技術開発

概要

プルサーマルが当面のプルトニウム利用策として期待されていることを踏まえ、既存の軽水炉に比べ約3倍のプルトニウムを装荷することができる全炉心混合酸化物燃料原子炉に必要な技術開発を行う。

技術目標及び達成時期

2011年度までに、原子炉の開発に必要な設計、解析、試験等を行い、全炉心混合酸化物燃料原子炉技術を確立する。

研究開発期間

1996年度～2011年度

< 軽水炉サイクルから高速増殖炉サイクルへの円滑な移行のための技術開発 >

(4) 高速炉再処理回収ウラン等除染技術開発

概要

FBR実証炉及び関連サイクル施設の早期実現を図るため、文部科学省と連携し、「高速増殖炉サイクル実用化研究開発」を推進する。そのなかで、次世代再処理工場から発生する高線量回収ウラン等を既存軽水炉燃料製造施設で取扱可能とする、次世代再処理工場と調和可能な回収ウラン等の除染技術について、調査・基礎試験等を行い、商業的に利用可能な除染技術候補の検討等を実施する。選定された技術については、プロセス試験等を実施する。

技術目標及び達成時期

2010年度までに、回収ウラン等の除染プロセスの候補技術の洗い出し及び候補プロセス技術の基礎試験を終了し、次世代再処理技術との適合性の検証を行い、プロセス試験を実施すべき除染プロセス技術を選定する。

また、2015年までに、選定した除染プロセス技術について工学化規模でのプロセス試験を行い、商業的に利用可能な転換前高除染技術としての実効性を検証する。

研究開発期間

2007年度～2015年度

< ウラン濃縮技術の高度化 >

(5) 遠心法ウラン濃縮技術開発

概要

我が国におけるウラン濃縮技術や生産能力の維持・向上のため、世界最高水準

の性能を有するなど国際的に比肩し得る経済性と性能を有する新型遠心分離機を開発する。

技術目標及び達成時期

2009年度までに、国際役務価格\$100/kg SWU相当を目指して、現在実用化している金属胴遠心分離機の約5倍という高い分離性能や同遠心分離器を上回る寿命など国際的に比肩し得る技術レベルを有する新型遠心分離機の開発を目指すとともに、最終仕様の新型遠心分離機を多数台用いたカスケード試験の実施により商用プラントとしての信頼性を確立し、運転要領の策定を行う。

研究開発期間

2002年度～2009年度

< 回収ウラン >

(6) 回収ウラン利用技術開発

概要

六ヶ所再処理工場で回収される回収ウランを再濃縮し、再び軽水炉で利用するため、濃縮施設等既存施設への影響等を把握し、転換プロセスを中心とした回収ウラン利用技術を開発する。併せて劣化ウラン酸化固形化についても検討を行う。

技術目標及び達成時期

2012年頃までに、劣化ウランの取扱・管理の容易さや貯蔵効率を向上させるための劣化ウラン酸化固形化（再転換を含む）技術の研究開発を行い、同技術に係る基礎プロセスを確立する。2015年度頃までに、再処理により回収される回収ウランの濃縮が可能な商用遠心分離機的设计を確定する。

研究開発期間

2008年度～2015年度

< 共通基盤技術開発 >

(7) 革新的実用原子力技術開発

概要

第4世代原子力システムに関する国際フォーラム（GIF）や国際原子力エネルギー・パートナーシップ（GNEP）等の国際協力枠組みにおいて国際連携による研究開発が提案されている技術分野や、近年希薄化が懸念される原子力を支える基盤技術分野について、産業界の参画やニーズ提示のもと、大学等が実施する研究活動への支援や将来の原子力人材の育成を実施しており、各分野の目的に沿った革新的な技術開発を行う。

技術目標及び達成時期

2011年度まで、基盤技術分野、国際協力技術分野において個別テーマ毎に研究開発を実施する。

研究開発期間

2000年度～2011年度（見直し）

4 - - . 高速増殖炉（FBR）サイクル

（1）発電用新型炉等技術開発

概要

FBR実証炉及び関連サイクル施設の早期実現を図るため、文部科学省と連携し、「高速増殖炉サイクル実用化研究開発」を推進する。具体的には、実証炉に必要な要素技術のうち、設計・建設段階において必要となる実プラント技術として、格納容器設計技術、耐震性評価技術、高温材料設計技術、保守・補修技術、大型構造物製作技術の試験等を実施する。

技術目標及び達成時期

2010年度までに、実証炉の概念設計へ反映しうる設計基準データ等の技術的根拠を得る。

研究開発期間

2007年度～2010年度

（2）高速炉再処理回収ウラン等除染技術開発（4 - - 参照）

4 - - . 放射性廃棄物処理処分

（1）地層処分技術調査等

概要

）地層処分共通技術開発

高レベル放射性廃棄物等の地層処分における共通的技术として、今後段階的に進められる処分地選定の際に重要となる地質等調査技術の高度化開発を行う。

）高レベル放射性廃棄物関連処分技術開発

高レベル放射性廃棄物処分に係る基盤技術として、人工バリア等の長期性能評価技術、処分場操業の際のオーバーパック溶接や搬送・定置等の遠隔操作技術の開発を行う。

）TRU廃棄物処分関連技術開発

TRU廃棄物の地層処分に係る基盤技術として、高レベル放射性廃棄物との併置処分の可能性も念頭に、TRU廃棄物に固有に含まれる核種の閉じ込め技術や人工バリア等の長期性能評価技術の開発を行う。

技術目標及び達成時期

）地層処分共通技術開発

2011年度までに、処分地選定の初期段階で必要となる地上からの調査技術のうち、特に沿岸域の環境や高精度での地下水評価等に係る調査評価技術の高度化・確証を行う。

）高レベル放射性廃棄物関連処分技術開発

2011年度までに、人工バリア等の長期性能評価技術や遠隔操作等の工学技術について高度化を図り、幅広い地質環境に対応可能な技術選択肢と成立性を提示する。

）TRU廃棄物処分関連技術開発

2011年度までに、TRU廃棄物に固有に含まれるヨウ素129や炭素1

4の閉じ込め、高アルカリ環境下での人工バリアの性能評価等に関し、幅広い地質環境に対応可能なデータ・モデルの整備と技術選択肢の提示を行う。

研究開発期間

1998年度～2011年度

(2) 管理型処分技術調査等

) 地下空洞型処分施設性能確認試験

概要

T R U廃棄物や発電所廃棄物等の余裕深度処分において検討されている「地下空洞型処分施設」の成立性確認のため、実規模大の空洞を利用した総合的な確認試験を行う。

技術目標及び達成時期

2011年度までに、実規模大の空洞内にコンクリートピット等からなる地下空洞型処分施設を構築し、施工性や初期性能の総合的な確認を行う。

研究開発期間

2006年度～2011年

(3) 放射性廃棄物共通技術調査等

概要

) 放射性廃棄物重要基礎技術研究調査

放射性廃棄物処分に係る国内外の最新知見の収集・分析、重要かつ基礎的な課題の抽出並びに研究を実施し、長期に及ぶ処分事業等を支える技術基盤の拡充を図る。

) 放射性核種生物圏移行評価高度化調査

放射性廃棄物処分の安全評価に共通的な基盤情報として、生物圏における核種移行プロセスを評価するため、日本の風土を反映した核種移行パラメータ・モデルを整備する。

技術目標及び達成時期

) 放射性廃棄物重要基礎技術研究調査

2011年度までに、放射性廃棄物処分に共通的な重要基礎技術として、地質環境の長期安定性評価、人工バリアや岩盤の長期挙動評価等に係る知見を整備する。

) 放射性核種生物圏移行評価高度化調査

2011年度までに、沿岸域の環境も含めたわが国表層環境への適用とT R U廃棄物に固有の核種等を考慮した、生物圏核種移行のモデルとデータベースを構築する。

研究開発期間

2001年度～2011年度

4 - - . 原子力利用推進に資する電力系統技術

(1) イットリウム系超電導電力機器技術開発(運営費交付金)

概要

世界的にも我が国が最先端の技術力を有する次世代高温超電導線材を活用し、経済社会の基盤となる電力の安定的かつ効率的な供給システムを実現するため、系統を適正に制御し、電力供給を安定化させるための技術及び発電電力を無駄なく輸送するための高効率な送電技術の確立を目指す。

技術目標及び達成時期

2012年度までに、イットリウム系超電導線材を用いたSME S、電力ケーブル、変圧器実現のための重要な技術開発を行い、各機器の成立性を実証する。

研究開発期間

2008年度～2012年度

(2) 高温超電導ケーブル実証プロジェクト(運営費交付金)

概要

革新的な高効率送電技術を確立して高温超電導ケーブルの実用化を促進するため、工業生産プロセスで実用化レベルに達している高温超電導線材(DI-BSCCO等)を活用し、首都圏の系統に接続する実証試験及び評価を行う。

なお、本事業は、発電用施設による電気の供給の円滑化を図る観点から行うものである。

技術目標及び達成時期

2011年度までに、200MVA級の中間接続部を有した三心一括型高温超電導ケーブルを、冷却装置や保護装置などの付帯設備とともに66KV実系統に接続して、12ヶ月以上の長期連系試験を行うことによって総合的な安全性や信頼性を実証する。

研究開発期間

2007年度～2012年度

4 - - . その他電力供給安定化技術

(1) 大規模電力供給用太陽光発電系統安定化等実証事業(運営費交付金)

概要

大規模太陽光発電を電力系統に連系した場合に課題となる系統安定化対策やピーク対策のための技術等を開発するとともに、その有効性を実証する。

また、国内外の先進的な次世代技術の価格性能を比較することを通じて技術開発を加速する。

技術目標及び達成時期

2010年度までに、下記の実証研究を行い、その有効性を確認する。

(イ) 蓄電池等を組み合わせた出力変動抑制システムの有効性。

(ロ) 発電出力のピーク制御(午後のピーク帯へのシフト)の有効性。

(ハ) 大型インバータによる高調波抑制システムの有効性。

(ニ) 国内外メーカーの太陽電池モジュールの特性比較を行い、性能、経済性等

を比較・検証。

研究開発期間

2006年度～2010年度

(2) 次世代蓄電システム実用化戦略的技術開発(運営費交付金)

概要

蓄電池技術は、新エネルギーの出力安定化や燃料電池自動車(FCEV)・ハイブリッド自動車(HEV)・電気自動車(EV)等の高効率次世代自動車に共通する重要なコア技術である。そこで、高性能蓄電システムに係る要素技術開発、新材料開発及び基盤技術の開発を行う。

A．系統連系円滑化蓄電システム技術開発

B．次世代自動車用高性能蓄電システム技術開発

技術目標及び達成時期

A．2010年度末において、寿命10年、コスト4万円/kWh、1MW規模のシステムおよび要素技術の確立と2030年において寿命20年、コスト1.5万円/kWh、20～30MW規模の蓄電システムを見通せる技術開発。また、新エネルギー対応の充放電パターン等、基礎データの整備、大型化に伴う安全性や寿命等の評価手法の確立。

B．2011年度末において、電池開発では、0.3kWhモジュールを作製し、重量エネルギー密度100Wh/kg、出力密度2000W/kg、寿命10年、コスト4万円/kWhを達成すること(条件:3kWhの組電池、100万台生産ベース)。電池構成材料及び電池反応制御技術の開発では重量エネルギー密度200Wh/kg、出力密度2500W/kg、コスト3万円/kWhを小型単電池で達成すること(上記と同条件)。たま、電池周辺機器開発では、格段の高性能化、コンパクト化、低コスト化を達成すること。さらに、重量エネルギー密度500Wh/kgを見通せる新規概念・構造の蓄電池基礎開発の他、劣化・寿命診断法、安全性評価などの各種試験法等の開発およびそれら共通基盤技術の基準・標準化。

研究開発期間

2007年度～2011年度

(3) 発電プラント用超高純度金属材料の開発(運営費交付金)

概要

超高純度金属材料を発電設備の蒸気配管等に実用化することを目指し、高純度金属材料の高度化に向けた低コスト・量産化製造技術を開発し、実使用環境における超高純度金属材料の耐久性試験等を行う。

なお、本事業は、発電用施設における電気の供給の円滑化を図る観点から行うものである。

技術目標及び達成時期

2009年までに、不純物総量100ppm未満、溶解量数100kg以上の低コスト・量産化技術製造技術を開発するとともに、製造された超高純度材料が発電プ

ラントの各種機器に適用でき、本材料の持つ優れた特性を長期に亘って発揮できることを確認する。

研究開発期間

2005年度～2009年度

4 - . 化石燃料の安定供給確保と有効かつクリーンな利用

4 - - . 石油・天然ガス・石炭の探鉱・開発・生産技術

(1) 石油・天然ガス開発・利用促進型大型/特別研究(運営費交付金)

概要

石油及び可燃性天然ガス資源の開発に係る技術の振興を図る観点から、大水深、複雑な地層といった悪条件化が進む石油・天然ガスの探鉱・開発技術、利用拡大が見込まれる天然ガス田の開発促進に資する天然ガス有効利用技術等について、短期間で実用化が期待され、民間ニーズに直結した研究開発を提案公募により実施する。

技術目標及び達成時期

2012年度までに、我が国の石油・天然ガスの探鉱・開発技術力の向上、及び天然ガスの利用の促進に向けた天然ガスの有効利用技術の開発を行う。

研究開発期間

2001年度～2012年度

(2) 石炭生産技術開発

概要

石油代替エネルギーである石炭の安定供給を図るため、発熱量が低いものの低灰分、低硫黄といった特徴を有する低品位炭の有効利用を目的として、低品位炭の発熱量を高め、自然発火性を抑制する低品位炭改質技術を開発する。

技術目標及び達成時期

2009年度までに、3500～5000kcal/kgの発熱量の低品位炭を瀝青炭並みの6000kcal/kg以上に改質する低品位炭改質技術を開発し、600t/d大型実証プラントでの製造技術を確立する。

研究開発期間

2006年度～2009年度

(3) 石油精製物質等簡易有害性評価手法開発(運営費交付金)

概要

石油の生産及び流通の合理化を図る観点から、石油製品等に含まれる化学物質によるリスクを把握し、必要な対策を適切に行うことを可能とするため、*in vitro*培養系技術等の活用により遺伝子組換え細胞等を用いた*in vitro*系簡易有害性予測手法、また、トキシコゲノミクスを活用した短期動物試験結果と相関する遺伝子発現データセットを開発する。

技術目標及び達成時期

2010年度までに、遺伝子導入技術、幹細胞分化誘導技術、生物発光技術等

を適用した培養細胞を用いて、試験期間1ヶ月程度、発がん性、催奇形性及び免疫毒性を予測評価できる試験手法を開発し、また、遺伝子発現解析技術を短期動物試験に適用し、28日間反復投与試験結果と相関する遺伝子発現データセットを完成させる。また、標準的な試験プロトコルを策定する。

研究開発期間

2006年度～2010年度

(4) 石油資源遠隔探知技術の研究開発

概要

我が国が開発・運用する多様な地球観測センサ(ASTER、PALSAR等)の地球観測データを用いて、石油・天然ガス等の安定供給確保のため、資源開発・探査、環境観測等に有効なデータの処理解析手法の研究開発を行う。また、地球観測データのような大容量のデータを容易に扱えるシステムの研究開発を実施することで資源開発・探査、環境観測を含む多様な分野でのリモートセンシングの利用拡大を図る。

技術目標及び達成時期

2010年度までに、資源開発・探査、環境観測等の分野における地球観測データ処理・解析技術の向上及び地球観測データの利用の拡大を図る。

研究開発期間

1981年度～2010年度

(5) ハイパースペクトルセンサ等の研究開発(運営費交付金)

概要

資源開発に有効な岩石・鉱物や地質構造解析の高次元解析を可能とするハイパースペクトルセンサの開発を行うとともに、軌道上におけるデータ取得の実証を行い、センサ技術の確立を行う。

技術目標及び達成時期

2011年度までにスペクトル分解能200バンド前後のハイパースペクトルセンサを開発し、地表面のスペクトル情報を取得して資源開発に有効なセンサ技術の実証を行う。

研究開発期間

2007年度～2011年度

(6) 次世代合成開口レーダ等の研究開発

概要

石油の生産及び流通の合理化を図る観点から行うものであり、石油及び可燃性天然ガス資源等の開発に資するため、資源探査能力を格段に向上した合成開口レーダである次世代合成開口レーダ(PALSAR)の健全性評価やセンサを維持することにより、取得される画像データを用いた石油・天然ガス資源の遠隔探知を行う技術を確立する。

技術目標及び達成時期

PALSAARの開発、健全性の評価・維持を実施することにより、2010年度までに、レーダ技術の高度化（アンテナ指向の電子制御化、分解能の向上、多偏波観測等）を図る。

研究開発期間

1993年度～2010年度

(7) 極軌道プラットフォーム搭載用資源探査観測システムの研究開発

概要

石油の生産及び流通の合理化を図る観点から行うものであり、石油及び可燃性天然ガス資源等の開発に資するため、資源探査能力を格段に向上した光学センサである資源探査用将来型センサ（ASTER）の健全性評価やセンサを維持することにより、取得される画像データを用いた石油・天然ガス資源の遠隔探知を行う技術を確立する。

技術目標及び達成時期

ASTERの開発、健全性の評価・維持を実施することにより、2010年度までに、センサ技術の高度化（ポインティング機能の追加、分解能の向上、熱センサの搭載等）を図る。

研究開発期間

1987年度～2010年度

4 - - . 石油・天然ガスの有効利用技術

(1) 石油燃料次世代環境対策技術開発

概要

バイオマス燃料から製造した石油製品が自動車排出ガスに及ぼす影響、新たな自動車燃焼技術（自着火燃焼（着火までに燃料と空気を十分に混合し、その混合気体を点火プラグの使用なしで圧縮することにより着火させる燃焼法でNOx排出低減、熱効率が高い等の利点がある））に適応した燃料に関する技術開発を実施する。

また、建設機械、発電機等のオフロードエンジンの排ガスによる環境負荷低減や石油燃焼機器の効率的な利用を進めるための技術開発を実施する。

技術目標及び達成時期

バイオマス燃料の利用時における、燃料と自動車エンジン技術の両面の影響評価を進め、技術的課題を解決し、運輸部門における燃料多様化を目指す。

また、オフロードエンジンの規制は欧米が先行していることから、2012年頃、欧米において規制強化が予定されている排ガス規制に対応した技術を確立し、我が国における規制強化に対応可能な燃焼技術を実現することを目指す。

研究開発期間

2002年度～2011年度

(2) 石油精製高度機能融合技術開発

概要

石油精製業を中心とする石油コンビナート全体の横断的かつ高度な運営機能の融合を図り、単独企業のみでは達成困難なコンビナート域内の省資源、省エネルギーの向上を進めるため、異業種異企業間における限りある貴重なエネルギー資源の利用効率の高い生産技術に関し技術の開発・実証を行う。

技術目標及び達成時期

2009年度までに、我が国における他のコンビナートへの波及効果を含め、CO₂排出量を63万トン/年削減可能とする技術を確立する。

研究開発期間

2006年度～2009年度

(3) 将来型燃料高度利用技術開発

概要

省エネ、二酸化炭素削減効果が見込まれる燃料電池自動車の燃料である高純度(99.99%以上)水素を安定的かつ経済的に供給することは重要である。石油は、その長所として豊富な水素供給余力と安価な水素製造技術及び全国に展開した災害に強いガソリンスタンドを保有している。これら石油の長所を活かした水素供給システムの確立により、水素社会の早期実現に貢献するものである。本事業では、製油所からの高純度水素供給技術開発とガソリンスタンドを拠点とする高純度水素製造技術開発を行う。

技術目標及び達成時期

コスト低減のため製油所におけるナフサから高効率(80%以上)な高純度水素製造を可能とする新たな技術を開発する。また、供給地のガソリンスタンドにおいて有機ハイドライドから高純度の水素を高効率(80%)に取り出すための水素発生装置を開発する。また、脱硫後の灯油硫黄分を検出限界以下の10ppb以下とする脱硫剤の開発を行うとともに、貴金属使用量を2-3wt%から0.5wt%以下まで低減しても、従来と同等の高い性能が維持できる改質触媒を開発する。さらに、膜分離型反応器を用いた99.99%高純度水素の製造効率を80%、4万時間の耐久性が期待できる水素製造システムを開発する。

研究開発期間

2008年度～2010年度

(4) 革新的次世代石油精製等技術開発

概要

原油価格の高騰・高止まりや原油の重質化と製品需要構造変化等の石油を巡る大きな環境変化のなか、連産品である石油製品を今後とも長期的に安定化かつ効率的に供給するためには、製油所の更なる高度化に向けた技術の開発実用化が必要である。このため、非在来型原油を含めた重質油を原料として、製油所におけるボトムレス化、余剰となる分解留分の高付加価値等のためのプロセスや触媒技術等の開発を行う。また、次世代の技術シーズ創出のため、これまでの技術とは

異なる発想により我が国唯一の革新的な新規触媒研究、新規膜分技術研究、新規製造プロセス研究等を産官学の連携等により実施する。

技術目標及び達成時期

2011年度までに重質油対応型高過酷度接触流動分解技術(HS-FCC)については、3千BD規模(商業レベルの1/10規模)の実証研究を通じ、プロピレン収率20%以上(既存技術4%程度)、将来不足が予想される高オクタン価ガソリン基材(RON98(既存技術92程度))の製造を可能とする技術を確立する。

研究開発期間

2007年度～2011年度

(5) 次世代高信頼性ガスセンサー技術開発

概要

一酸化炭素中毒やガス漏れなどのガス事故を限りなくゼロに近づけるため、センサー素子のナノレベルでのメカニズム解析及び開発設計を行い、コードレスで高信頼性を有する次世代高信頼性ガスセンサ(COセンサ・メタンセンサ)を開発する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

技術目標及び達成時期

2011年度までに、最先端のナノテクノロジー及びMEMS技術を導入し、電池駆動で5年以上の長寿命、高信頼性(数百ppm以下の故障率)、低コストなCOとメタンのセンサを開発する。

研究開発期間

2008年度～2011年度

(6) 天然ガスの液体燃料化(GTL)技術実証研究(運営費交付金)

概要

硫黄等を含まず排出ガスがクリーン、着火性が高いという特徴を有することから石油系燃料代替として期待されるGTLについて、天然ガス中に含まれるCO₂を除去せず、原料として積極的に活用することから、従来利用が困難であったCO₂を多く含むガス田からの天然ガスが利用可能、CO₂除去装置が不要であることによる生産設備コストの低減が可能、といった強みを有する我が国独自のGTL製造技術の確立を図る。

技術目標及び達成時期

2010年度までに、実証プラントによる運転研究(500バレル/日)を行い、商業規模でのGTL製造技術を確立する。

研究開発期間

2006年度～2010年度

(7) 石油・天然ガス開発・利用促進型大型/特別研究(運営費交付金)(4 - - 参照)

(8) 高効率ガスタービン実用化技術開発(4 - - 参照)

4 - - .メタンハイドレート等非在来化石資源の利用技術

(1)メタンハイドレート開発促進委託費

概要

日本周辺海域に相当量の賦存が見込まれ、国産のクリーンなエネルギー資源として有望なメタンハイドレートを利用可能とするため、資源量評価手法、生産手法及び環境影響評価手法等の確立のための技術開発を行う。

技術目標及び達成時期

2016年度までに、商業的産出のための技術を整備することを目指し、日本周辺海域におけるメタンハイドレートの賦存状況と特性の明確化、有望賦存海域からのメタンハイドレート資源フィールドの選択及び現場産出試験等による生産手法の確立等を推進する。

研究開発期間

2001年度～2016年度

(2)革新的次世代石油精製等技術開発(4 - - 参照)

4 - - .石炭クリーン利用技術

(1)革新的ゼロエミッション石炭火力発電プロジェクト

概要

石炭の高効率な利用を図るために、

- ・酸素吹きによる石炭ガス化発電の開発実証及び化学吸収法によるCO₂の分離・回収技術の実証
- ・石炭ガス化発電からCCSまで一貫したトータルシステムの設計等
- ・次世代IGCC(石炭ガス化複合発電)など革新的な石炭ガス化技術にかかる先進基盤研究

を行う。

技術目標及び達成時期

2009年度までに、パイロットプラントにおいて、高圧の石炭ガスからCO₂の分離・回収技術の確立及びガス化炉の信頼性向上へ向けて、3炭種以上の適応炭種拡大試験を実施する。

研究開発期間

2007年度～2012年度

(2)国際革新的ゼロエミッション石炭火力発電プロジェクト補助金

概要

石炭火力発電から排出されるCO₂の削減技術について諸外国との実証事業等を実施し、当該技術の普及基盤を整備することにより、エネルギー供給に対する環境上の制約を取り除き、もって我が国エネルギー需給構造の安定化を図る。

技術目標及び達成時期

石炭ガス化技術等実証普及事業では、海外において取り組みが進められているゼロエミッション型石炭火力発電の石炭ガス化・発電技術、CO₂分離回収技術、

CO₂ 輸送貯留技術等に関する情報収集や関連する技術調査の実施等により、我が国におけるゼロエミッション型石炭火力発電の実用化開発に資する技術・知見を得る。

酸素燃焼国際共同実証事業では、既存の微粉炭火力発電の改造による酸素燃焼方式のゼロエミッション型石炭火力発電プラントの実用化を目標とするものであり、既存のプラントの改造により対応可能であること、酸素燃焼を行うことにより、燃焼ガスからCO₂を分離する装置が不要であることから、比較的lowコストで極めて大きなCO₂削減効果が期待できる。

石炭火力発電原油増進回収国際共同事業では、2008年5月の日中首脳会談で合意された「日中間でのCCS-EOR（二酸化炭素の回収・貯留、石油増進回収法）協力」に係る日中共同事業として、中国における石炭火力発電CCS-EOR事業の事前調査としてCCS-EORの有効性確認、CCS-EORの経済性・事業実現性等を検討する。これらにより、多量のCO₂排出削減を実現するモデルの構築、世界のCO₂排出削減への貢献が期待出来る。

研究開発期間

2007年度～2016年度

(3) 先進超々臨界圧火力発電実用化要素技術開発費補助金

概要

従来の超々臨界圧火力発電（USC）は、蒸気温度の最高温度は630 程度が限界で、送電端熱効率も42～43%が原理的限界といわれてきた。しかしながら、近年の材料技術の進歩により、700 以上の蒸気温度を達成できる可能性が見えてきたことから、これらの材料を活用した先進超々臨界圧火力発電技術（A-USC）の開発を行うものである。A-USC は、蒸気温度700 級で46%、750 級で48%の高い送電端熱効率の達成が可能な技術であり、2020年以降増大する経年石炭火力発電のリプレース需要に対応するため、早急に技術開発を進める必要がある。そのため、ボイラーメーカー、タービンメーカー及び材料メーカーが共同でA-USC の技術開発に取り組む。

技術目標及び達成時期

平成22年度までにシステム基本設計を完了し、シミュレーションにより送電端熱効率46%～48%の達成が可能なことを確認する。平成24年度までにボイラー、タービン部材等が700 以上の蒸気温度に耐えられるかどうかを試作、評価し、経済性を含めたシステム成立性への見通しを得る。平成27年～平成28年度に実缶試験、回転試験を実施し、蒸気温度700 以上の条件下でボイラー、タービンの信頼性を確認する。また、ボイラー、タービン部材について3万～7万時間の長期信頼性試験を実施し材料特性を検証する。

研究開発期間

2008年度～2016年度

(4) 石炭利用技術開発(一部、運営費交付金)

概要

環境適合的な石炭利用の拡大を図るため、石炭利用プロセスにおける環境影響を低減させる手法の開発等、クリーン・コール・テクノロジーの開発を行う。

技術目標及び達成時期

2009年度までに、

- ・ 化学原料等に利用可能な合成用ガスを石炭乾留ガスから無触媒で製造する技術をパイロットプラントで確立する(無触媒石炭乾留ガス改質技術開発)。

2011年度までに、

- ・ 石炭利用プロセスにおいて、環境分析技術の高精度化、環境影響成分の挙動解析のためのモデルの構築等により、環境への影響低減手法を開発する(戦略的炭化ガス化・燃焼技術開発)。

研究開発期間

1995年度～2011年度

- ・ 戦略的炭化ガス化・燃焼技術開発 2007年度～2011年度
- ・ 無触媒石炭乾留ガス改質技術開発 2006年度～2009年度

(5) 噴流床石炭ガス化発電プラント開発費補助金

概要

供給安定性に優れた石炭の高効率かつ低環境負荷での利用を図るため、石炭をガス化して燃料とし、コンバインドサイクル(ガスタービンと蒸気タービンの組合せ)を駆動する高効率発電技術(石炭ガス化複合発電技術(IGCC: Integrated coal Gasification Combined Cycle)の実証試験を行う。

技術目標及び達成時期

2009年度までに、25万kWの実証機を用いた実証試験により、熱効率40.5%(送電端、高位発熱量ベース)を目指す。この目標は50万kWの商用機における熱効率46～48%に相当する。本技術は実証試験終了後の2010年度より商用化が可能である。

研究開発期間

1999年度～2009年度

(6) 資源対応力強化のための革新的製鉄プロセス技術開発(運営費交付金)(4 - 参照)

4 - - . その他・共通

- (1) 新エネルギー技術実用化補助事業 (運営費交付金)(4 - - 参照)
- (2) 非化石エネルギー産業技術研究助成事業 (運営費交付金)(4 - - 参照)
- (3) 固体高分子形燃料電池実用化戦略的技術開発 (運営費交付金)(4 - - 参照)
- (4) 燃料電池先端科学研究 (運営費交付金)(4 - - 参照)
- (5) 固体酸化物形燃料電池システム要素技術開発 (運営費交付金)(4 - - 参照)
- (6) 水素製造・輸送・貯蔵システム等技術開発 (運営費交付金)(4 - - 参照)
- (7) 水素貯蔵材料先端基盤研究 (運営費交付金)(4 - - 参照)
- (8) 水素社会構築共通基盤整備事業 (運営費交付金)(4 - - 参照)
- (9) 水素先端科学基礎研究事業 (運営費交付金)(4 - - 参照)
- (10) 固体酸化物形燃料電池実証研究 (運営費交付金)(4 - - 参照)
- (11) 燃料電池システム等実証研究 (運営費交付金)(4 - - 参照)

5．政策目標の実現に向けた環境整備（成果の実用化、導入普及に向けた取組）

5 - 1．総合エネルギー効率の向上

- 事業者単位の規制体系の導入
- 住宅・建築物に係る省エネルギー対策の強化
- セクター別ベンチマークの導入と初期需要創出（高効率機器の導入補助等）
- トップランナー基準の対象機器の拡充等
- アジアにおける省エネルギー対策の推進を通じた我が国の国際競争力の向上
- 国民の省エネルギー意識の高まりに向けた取組

5 - 2．運輸部門の燃料多様化

- 公共的車両への積極的導入
- 燃費基準の策定・改定
- アジアにおける新エネルギー協力
- 国際標準化による国際競争力向上

5 - 3．新エネルギー等の開発・導入促進

- 補助金等による導入支援
- 新エネルギーベンチャービジネスに対する支援の拡大
- 新エネルギー産業構造の形成
- 電気事業制度・ガス事業制度の在り方の検討

5 - 4．原子力利用の推進とその大前提となる安全の確保

- 電力自由化環境下での原子力発電の新・増設の実現
- 資源確保戦略の展開
- 次世代を支える人材育成
- 中小型炉の海外市場への展開、我が国原子力産業の国際展開支援
- 原子力発電拡大と核不拡散の両立に向けた国際的枠組み作りへの積極的関与
- 国と地域の信頼強化

5 - 5．化石燃料の安定供給確保と有効かつクリーンな利用

- 資源国等との総合的な関係強化（研究開発の推進・協力、人材育成・技術移転、経済関係強化など）
- 化石燃料のクリーンな利用の開拓

6．研究開発の実施に当たっての留意事項

事業の全部又は一部について独立行政法人の運営費交付金による実施されるもの（事業名に（運営費交付金）と記載したもの）は、中期目標、中期計画等に基づき、運営費交付金の総額の範囲内で当該独立行政法人の裁量によって実施されるものである。

また、事業名に（採択テーマ）と記載された事業は、提案公募事業により採択されたテーマを記載したものであり、その採択や評価等は、提案公募事業の実施機関の責任の下、実施されるものである。

7. 改訂履歴

- (1) 平成16年7月7日付け、省エネルギー技術開発プログラム基本計画、新エネルギー技術開発プログラム基本計画、燃料技術開発プログラム基本計画、電力技術開発プログラム基本計画、原子力技術開発プログラム基本計画制定。固体高分子形燃料電池/水素エネルギー利用プログラム基本計画(平成16・02・03産局第6号)は、新エネルギー技術開発プログラム基本計画に統合することとし、廃止。
- (2) 平成17年3月31日付け制定。省エネルギー技術開発プログラム基本計画(平成16・06・04産局第8号) 新エネルギー技術開発プログラム基本計画(平成16・06・04産局第10号) 燃料技術開発プログラム基本計画(平成16・06・04産局第12号) 電力技術開発プログラム基本計画(平成16・06・04産局第11号) 原子力技術開発プログラム基本計画(平成16・06・04産局第13号)は、廃止。
- (3) 平成18年3月31日付け制定。省エネルギー技術開発プログラム基本計画(平成17・03・25産局第14号) 新エネルギー技術開発プログラム基本計画(平成17・03・25産局第9号) 燃料技術開発プログラム基本計画(平成17・03・25産局第17号) 電力技術開発プログラム基本計画(平成17・03・25産局第12号) 原子力技術開発プログラム基本計画(平成17・03・25産局第13号)は、廃止。また、次世代低公害車技術開発プログラム基本計画(平成17・03・29産局第2号)は、省エネルギー技術開発プログラム基本計画及び燃料技術開発プログラム基本計画に統合することとし、廃止。
- (4) 平成19年4月2日付け制定。省エネルギー技術開発プログラム基本計画(平成17・03・31産局第19号) 新エネルギー技術開発プログラム基本計画(平成18・03・31産局第15号) 燃料技術開発プログラム基本計画(平成18・03・31産局第18号) 電力技術開発プログラム基本計画(平成18・03・31産局第17号) 原子力技術開発プログラム基本計画(平成18・03・31産局第16号)は、廃止。
- (5) 平成20年4月1日付け、エネルギーイノベーションプログラム基本計画制定。省エネルギー技術開発プログラム基本計画(平成19・03・26産局第1号) 新エネルギー技術開発プログラム基本計画(平成19・03・20産局第4号) 燃料技術開発プログラム基本計画(平成19・03・19産局第7号) 電力技術開発プログラム基本計画(平成19・03・16産局第3号) 原子力技術開発プログラム基本計画(平成19・03・23産局第2号)は、本プログラム基本計画に統合することとし、廃止。
- (6) 平成21年4月1日付け制定。エネルギーイノベーションプログラム基本計画(平成20・03・25産局第5号)は廃止。

(エネルギーイノベーションプログラム)
「水素貯蔵材料先端基盤研究事業」基本計画

燃料電池・水素技術開発部

1. 研究開発の目的・目標・内容

(1) 研究開発の目的

資源に乏しい我が国が、将来にわたり持続的発展を達成するためには、革新的なエネルギー技術の開発、導入・普及によって、各国に先んじて次世代型のエネルギー利用社会の構築に取り組んでいくことが不可欠である。このため、政府が長期を見据えた将来の技術進展の方向性を示し、官民双方がこの方向性を共有することで、将来の不確実性に対する懸念が緩和され、官民において長期にわたり軸のぶれない取組の実施が可能となることを目指し「エネルギーイノベーションプログラム」が制定された。本事業は、その「エネルギーイノベーションプログラム」の一環として実施する。

燃料電池は、上記の目的達成に向けたキーテクノロジーとして、その実用化への期待が高く、燃料電池実用化戦略研究会(経済産業省資源エネルギー庁長官の私的研究会、1999年12月設置)において「固体高分子形燃料電池／水素エネルギー利用技術開発戦略」が策定され、産学官が一体となって燃料電池実用化のための技術開発等に積極的に取り組むべきことが提言されている。

政府の第3期科学技術基本計画(2006年3月閣議決定)においては、「先進燃料電池システムと安全な革新的水素貯蔵・輸送技術」が戦略重点科学技術として選定されている。また、経済成長戦略大綱(2006年7月財政・経済一体改革会議決定)においても、運輸エネルギーの次世代技術開発が重点分野として位置付けられている。

このように、官民挙げて燃料電池の導入・普及に積極的に取り組んでいるところであるが、水素エネルギー社会実現のためには大量の水素をコンパクトかつ効率的に輸送貯蔵する技術が必要である。

現在、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「水素貯蔵材料(水素を吸蔵することが可能な合金等)」が注目を浴びている。しかしながら、現状の性能では実用化には十分ではなく、実用化・普及のためには水素貯蔵能力の大幅な性能向上が必要とされている。車載用には5～6質量%以上の高い水素貯蔵量を持つ材料の開発、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)を有する材料の開発及び十分な耐久性を有する材料の開発などが主たる研究開発課題としてあげられている。これらの材料開発にあたり水素貯蔵材料に関する基本原理から解明し、それに基づいて応用技術の発展を図らなければ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はもたらされない。

このため、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技術開発

機構」という。)は、高性能かつ先端的水素貯蔵材料開発に必要な水素貯蔵に関する基本原理の解明及び材料の応用技術に必要な基盤研究を幅広い分野で横断的に行い、水素貯蔵材料の基本原理の解明、計算科学等材料研究への応用技術の基礎を確立する。本事業により得られた成果を水素貯蔵材料の開発指針として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及び将来の燃料電池自動車の実用化・普及を図ることが期待される。

(2) 研究開発の目標

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。

研究開発項目① 金属系水素貯蔵材料の基礎研究

金属系水素貯蔵材料の構造解析を高度化し、水素吸蔵・放出反応特性の理解および反応機構の解明への道筋を見出す。

研究開発項目② 非金属系水素貯蔵材料の基礎研究

ナノ複合水素貯蔵材料の反応機構解明のための指針を得るとともに、電子状態や構造安定性を解明する。

研究開発項目③ 水素と材料の相互作用の実験的解明

水素と材料との相互作用により出現する構造の変化などの研究から、水素貯蔵材料の開発指針作成の方向性を定めるための基礎知見を獲得する。

研究開発項目④ 計算科学による水素貯蔵材料の基盤研究

種々の水素吸蔵材料について、電子密度分布、最安定な水素位置等を明らかにし、吸蔵特性等に寄与するミクロ構造等に関する指針を得る。

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

J-PARCにおける中性子全散乱装置の運用を開始し、中性子全散乱装置の性能を実証するとともに、水素位置情報の精密測定に用いる中性子制御デバイスの仕様を策定する。

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。

研究開発項目① 金属系水素貯蔵材料の基礎研究

金属系水素貯蔵材料の開発指針を提示する。

研究開発項目② 非金属系水素貯蔵材料の基礎研究

非金属系水素貯蔵材料の開発指針を提示する。

研究開発項目③ 水素と材料の相互作用の実験的解明

水素と材料の相互作用の実験的解明：高濃度水素化物の開発指針を提示する。

研究開発項目④ 計算科学による水素貯蔵材料の基盤研究

計算科学的手法による開発指針を提示する。

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

基盤技術としての中性子散乱法を確立する。

(3) 研究開発の内容

上記の目標を達成するため、以下の研究開発項目について、別紙の研究開発計画に基づき研究開発を委託により実施する。

- ① 金属系水素貯蔵材料の基礎研究
- ② 非金属系水素貯蔵材料の基礎研究
- ③ 水素と材料の相互作用の実験的解明
- ④ 計算科学による水素貯蔵材料の基盤研究
- 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

なお、本事業の推進にあたっては、水素製造・輸送・貯蔵システム等技術開発等における水素貯蔵材料開発事業とも連携しつつ、基盤的な研究を実施する。

2. 研究開発の実施方式

(1) 研究開発の実施体制

本研究開発は、NEDO技術開発機構が公募によって選定する本邦の企業、研究組合、公益法人、大学、公的研究機関等の研究機関が、NEDO技術開発機構がプロジェクトリーダーとして委嘱する、独立行政法人産業技術総合研究所エネルギー技術研究部門副研究部門長秋葉悦男氏の下で、それぞれの研究テーマの達成目標を実現すべく、研究開発を委託により実施する。なお、研究内容に応じて、海外研究機関を再委託先等として研究体制に含めることとする。

(2) 研究開発の運営管理

研究開発全体の管理・執行に責任を有するNEDO技術開発機構は、経済産業省及びプロジェクトリーダーと密接な関係を維持しつつ、プログラムの目的及び目標、並びに本研究開発の目的及び目標に照らし適切な運営管理を実施する。

具体的には、NEDO技術開発機構に設置する委員会や技術検討会等において外部有識者の意見を運営管理に反映させる他、四半期に一回程度、プロジェクトの進捗について報告を受けるなどを行う。また、事業を効率的に推進するために、情報と認識の共有を目的に、年に一回程度、本研究開発の実施者を集めた報告会を開催する。

3. 研究開発の実施期間

本研究開発の期間は、平成19年度から平成23年度までの5年間とする。

4. 評価に関する事項

NEDO技術開発機構は、技術的及び政策的観点から、研究開発の意義、目標達成度、成果の技術的意義並びに将来の産業への波及効果などについて、外部有識者による研究開発の中間評価を平成21年度に、事後評価を平成24年度に実施する。また、中間評価結果を踏まえ必要に応じプロジェクトの加速・縮小・中止等見直しを迅速に行う。なお、評価の時期につ

いては、当該研究開発に係わる技術動向、政策動向や当該研究開発の進捗状況等に応じて、前倒しする等、適宜見直すものとする。

5. その他の重要事項

(1) 研究開発成果の取扱い

① 研究成果の普及

本事業により得られた成果は、NEDO技術開発機構、プロジェクトリーダー及び研究実施者がともに、水素社会に向けた燃料電池自動車、定置用燃料電池システム、水素インフラ等の普及に資する企業等における材料開発及び国際標準形成に必要不可欠な基礎的科学的知見としてその普及に努めるものとする。

② 知的基盤整備事業又は標準化等との連携

得られた研究開発の成果については、知的基盤整備または標準化等との連携を図るため、データベースへのデータの提供、標準情報（TR）制度への提案等を積極的に行う。

③ 知的財産権の帰属

委託研究開発の成果に関わる知的財産権については、「独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構新エネルギー・産業技術業務方法書」第25条の規定等に基づき、原則として、すべて委託先に帰属させることとする。

(2) 基本計画の変更

NEDO技術開発機構は、研究開発内容の妥当性を確保するため、社会・経済的状況、内外の研究開発動向、政策動向、プログラム基本計画の変更、評価結果、研究開発費の確保状況、当該研究開発の進捗状況等を総合的に勘案し、達成目標、実施期間、研究開発体制等、基本計画の見直しを弾力的に行うものとする。

(3) 根拠法

本プロジェクトは、独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構法第15条第1項第一号ハに基づき実施する。

6. 基本計画の改訂履歴

(1) 平成19年3月、制定。

(2) 平成20年7月、イノベーションプログラム基本計画の制定により、「(1) 研究開発の目的」の記載を改訂。

(3) 平成21年3月、中間目標、最終目標の詳細化、研究開発項目の分類変更等による改訂。

(別紙) 研究開発計画

研究開発項目:

- ① 金属系水素貯蔵材料の基礎研究
- ② 非金属系水素貯蔵材料の基礎研究
- ③ 水素と材料の相互作用の実験的解明
- ④ 計算科学による水素貯蔵材料の基盤研究
- 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

1. 研究開発の必要性

現在、燃料電池自動車に大量の水素を、より安全に・簡便・効率的かつ低コストに輸送するための技術として「水素貯蔵材料(水素を吸蔵することが可能な合金等)」が注目を浴びているが、実用化・普及のためには水素貯蔵能力の大幅な性能向上が必要とされている。

そこで、高性能かつ先端的水素貯蔵材料開発に必要な水素貯蔵に関する基本原理の解明及び応用技術に必要な知見に係る基礎研究を幅広い分野で横断的に行い、その成果を先端的材料開発の技術開発指針として産業界へ提供することにより水素社会の真の実現を目指すことを目的に、水素貯蔵の基本原理の解明、応用技術に必要な知見に係る基礎研究を行う。

2. 研究開発の具体的内容

研究開発項目① 金属系水素貯蔵材料の基礎研究

金属系材料の結晶構造、局所構造、欠陥構造等の様々なスケールに対応した構造解析、および材料中の水素の存在位置、存在状態等の解明を行う。また、金属系材料に特有な結合状態や水素の格子中での位置に関する情報を得るために in situ(その場観察)測定が可能な手法の開発を進め、水素吸蔵機構の基本原理を解明する。

研究開発項目② 非金属系水素貯蔵材料の基礎研究

水素と非金属系元素間の結合の不安定化、水素と材料の反応機構の解明を行う。また、非金属系材料合成・探索に必要な革新的手法の開発等を行う。

研究開発項目③ 水素と材料の相互作用の実験的解明

先端的手法による固体中の水素の存在状態・構造・ダイナミクス等の解明を行う。また、固体中での水素の量子現象の解明とその利用を行う。

研究開発項目④ 計算科学による水素貯蔵材料の基盤研究

計算科学的手法による新規材料開発指針の提案を行う。また、システム設計に必要なシミュレーション手法及び材料の諸物性推算法の確立を行う。さらに、固体-水素系の計算に必要な手法の開発を行う。

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

先端デバイス技術の開発を行い、水素貯蔵材料評価用中性子全散乱装置として世界トップレベルの装置の実現を図るとともに、装置の基本的性能の検証を中心に行いながら、先端デバイスの実地試験研究を進める。

3. 達成目標

本事業の実施により、高性能かつ先端的水素貯蔵材料開発に必要な水素貯蔵に関する基本原理の解明及び応用技術に必要な知見に係る基礎研究を幅広い分野で行い、その成果を先端的材料開発の技術開発指針として産業界へ提供することにより水素社会が真に実現するために、必要となる水素貯蔵材料の基本原理解明、応用技術に必要な知見に係る基礎研究を行う。

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。

研究開発項目① 金属系水素貯蔵材料の基礎研究

金属系水素貯蔵材料の構造解析を高度化し、水素吸蔵・放出反応特性の理解および反応機構の解明への道筋を見出す。

研究開発項目② 非金属系水素貯蔵材料の基礎研究

ナノ複合水素貯蔵材料の反応機構解明のための指針を得るとともに、電子状態や構造安定性を解明する。

研究開発項目③ 水素と材料の相互作用の実験的解明

水素と材料との相互作用により出現する構造の変化などの研究から、水素貯蔵材料の開発指針作成の方向性を定めるための基礎知見を獲得する。

研究開発項目④ 計算科学による水素貯蔵材料の基盤研究

種々の水素吸蔵材料について、電子密度分布、最安定な水素位置等を明らかにし、吸蔵特性等に寄与するミクロ構造等に関する指針を得る。

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

J-PARCにおける中性子全散乱装置の運用を開始し、中性子全散乱装置の性能を実証するとともに、水素位置情報の精密測定に用いる中性子制御デバイスの仕様を策定する。

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。

研究開発項目① 金属系水素貯蔵材料の基礎研究

金属系水素貯蔵材料の開発指針を提示する。

研究開発項目② 非金属系水素貯蔵材料の基礎研究

非金属系水素貯蔵材料の開発指針を提示する。

研究開発項目③ 水素と材料の相互作用の実験的解明

水素と材料の相互作用の実験的解明：高濃度水素化物の開発指針を提示する。

研究開発項目④ 計算科学による水素貯蔵材料の基盤研究

計算科学的手法による開発指針を提示する。

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

基盤技術としての中性子散乱法を確立する。

エネルギー分野

資源に乏しいわが国が、将来にわたり持続的発展を達成するためには、革新的なエネルギー技術の開発、導入・普及によって、各国に先んじて次世代型のエネルギー利用社会の構築に取り組んでいくことが不可欠である。他方、エネルギー技術開発は、長期間を要するとともに大規模投資を伴う一方で将来の不確実性が大きいことから、民間企業が持続的な取組を行うことは必ずしも容易ではない。このため、政府が長期を見据えた将来の技術進展の方向性を示し、官民双方がこの方向性を共有することで、将来の不確実性に対する懸念が緩和され、官民において長期にわたり軸のぶれない取組の実施が可能となる。

また、「新・国家エネルギー戦略」や「エネルギー基本計画」においても、エネルギー技術戦略策定の必要性が明記されており「新・国家エネルギー戦略」が想定する2030年という長期の時間設定の中、超長期エネルギー技術ビジョン（2005年10月策定）を参考にしつつ、2006年11月策定のエネルギー技術戦略マップ2006をベースにし、技術戦略マップ2007（エネルギー分野）を作成した。技術戦略マップ2008は2007年5月の総理イニシアティブ「クールアース50」を受けて策定された「Cool Earth-エネルギー革新技术計画」（2008年3月策定）をもとに、足下の2030年頃までの見直しに変更があったものについて修正を行ったものである。

技術戦略マップ2009の策定に当たっては主に下記の3項目の内容について見直しを実施し、改訂を行った。

- ・省エネルギー技術戦略との整合【参考資料：省エネルギー技術戦略2009】
- ・既存ロードマップに最新技術を反映
- ・個別技術の統廃合（235技術→178技術（新2技術））

エネルギー分野の技術戦略マップ

I. 検討の手順

技術戦略マップは、政策目標を実現するために必要な技術を要素技術を含めて抽出した技術マップ、技術開発の進展を時間軸に沿って示した技術ロードマップ、及び技術開発とそれ以外の関連施策を併せて示した導入シナリオから構成されている。

本技術戦略マップの作成にあたっては、2006年に策定した「新・国家エネルギー戦略」における政策の柱を踏まえ、①総合エネルギー効率の向上、②運輸部門の燃料多様化、③新エネルギーの開発・導入促進、④原子力の利用、そして、⑤化石燃料の安定供給確保と有効かつクリーン利用、の5つの政策目標を設定した上で、これらに寄与する主なエネルギー分野の技術を抽出した。

①総合エネルギー効率の向上

②運輸部門の燃料多様化

③新エネルギーの開発・導入促進

④原子力利用の推進と その大前提となる安全の確保

⑤化石燃料の安定供給確保と 有効かつクリーンな利用

次に、抽出した技術を時間軸展開することによりロードマップの作成を行い、技術開発及びその成果が導入されるにあたって必要となる関連施策を整理した導入シナリオの作成を行った。

II. 技術の特徴付けについて

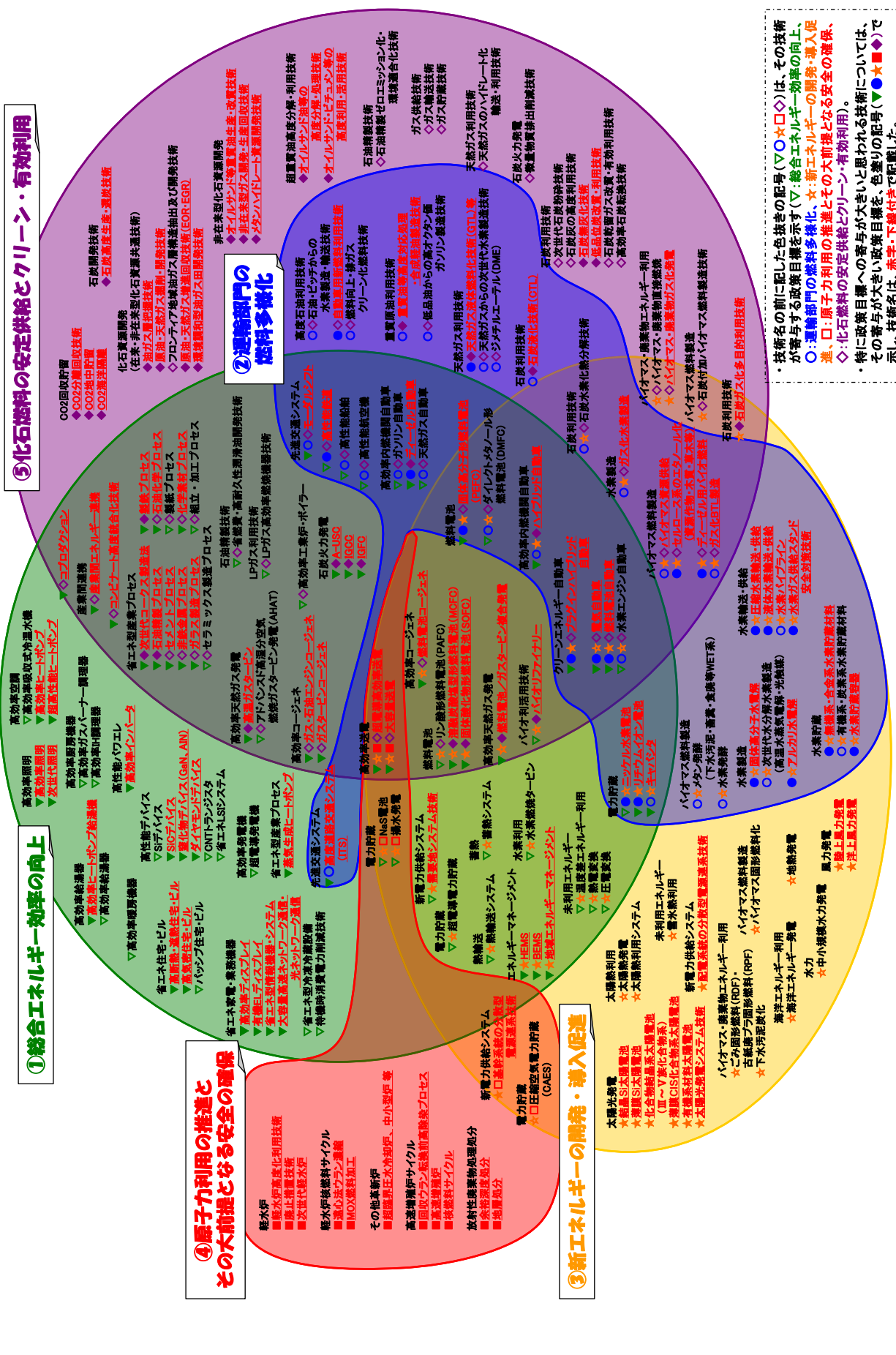
エネルギー技術分野全体を俯瞰するため、有識者にアンケート調査を行い、5つの政策目標に対する寄与について定性的な評価を行った。

評価項目	内容
政策目標に関する指標	
①総合エネルギー効率の向上	転換部門における「エネルギー転換効率向上」、産業部門における「製造プロセス効率向上」、民生・運輸部門における「省エネルギー」など、GDPあたりの最終エネルギー消費指数を向上することに寄与する技術
②運輸部門の燃料多様化	バイオマス由来燃料、GTL (Gas to Liquid)、BTL (Biomass to Liquid)、CTL (Coal to Liquid) などの新燃料、EV (電気自動車) やFCV (燃料電池自動車) など、運輸部門の石油依存度を低減することに寄与する技術
③新エネルギーの開発・導入促進	太陽、風力、バイオマス等を起源とするエネルギーに関連する技術の開発・導入促進に寄与する技術。また、再生可能エネルギーの普及に資する新規技術、エネルギー効率の飛躍的向上に資する技術、エネルギー源の多様化に資する新規技術など「革新的なエネルギー高度利用技術」も含む。
④原子力利用の推進とその大前提となる安全の確保	2030年以降においても、発電電力量に占める原子力発電の比率を30~40%程度以上とすることに寄与する技術。負荷平準化等、原子力利用の推進に資する技術や安全確保に資する技術も含む。
⑤化石燃料の安定供給とクリーン・有効利用	化石資源の開発・有効利用技術、CCT (クリーン・コール・テクノロジー) などのクリーン利用や、資源確保に資する技術

III. エネルギー技術全体の俯瞰図について

評価結果を基に、5つの政策目標に対する寄与を示したエネルギー技術全体を俯瞰するマップを作成した。

エネルギー技術 - 俯瞰図 -

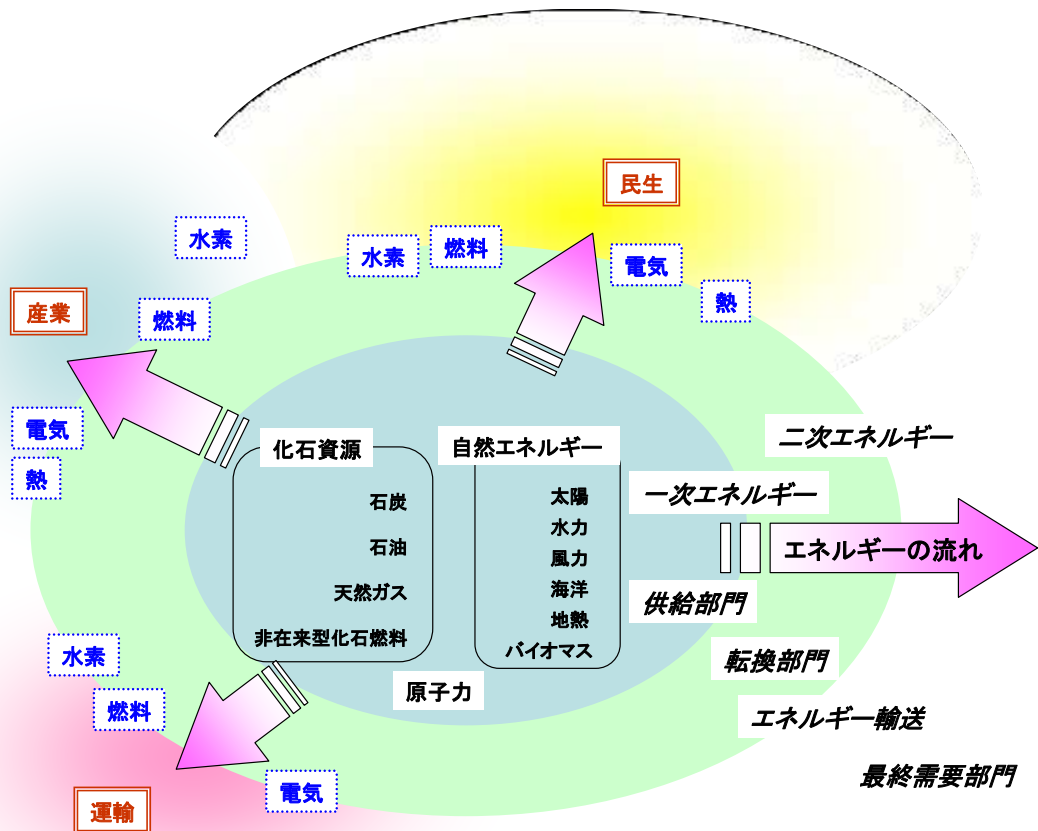


・ 技術名の前に記した色抜きの記号(▽○△◇)は、その技術が寄与する政策目標を示す(▽:総合エネルギー効率の向上、△:運輸部門の燃料多様化、◇:新エネルギーの開発・導入促進、○:原子力利用の推進とその大前提となる安全の確保、◇:化石燃料の安定供給とクリーン・有効利用)。
・ 特に政策目標への寄与が大きいと思われる技術については、その寄与が大きい政策目標を、色抜きの記号(▽○△◇)で示し、技術名は、赤字・下線付きで記載した。

IV 技術マップ・技術ロードマップ・導入シナリオの見方

○技術マップ

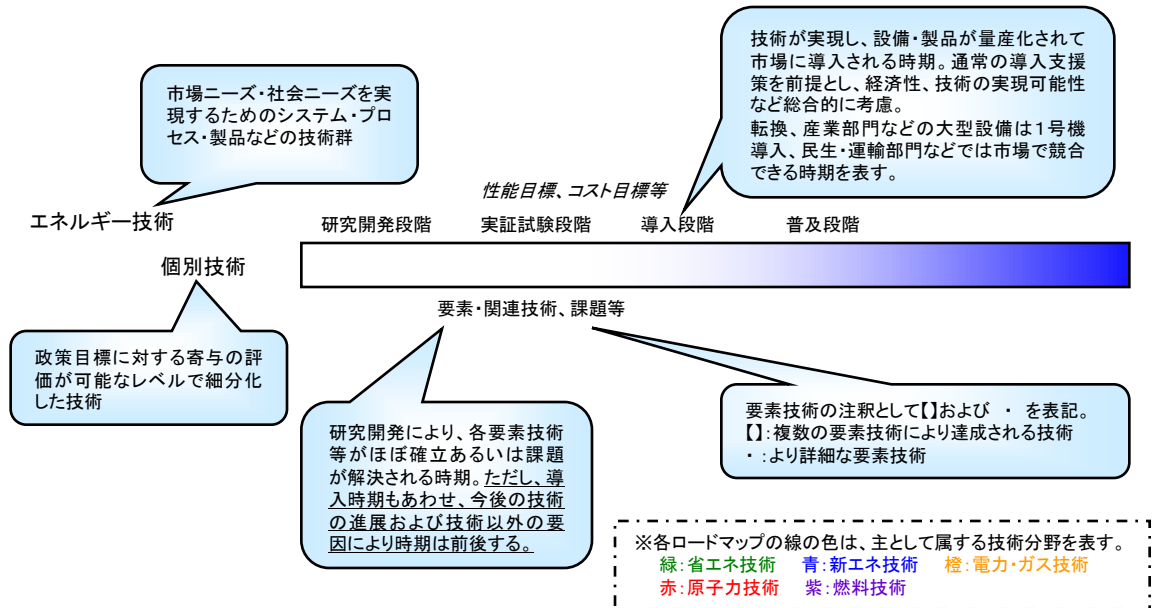
エネルギー分野全体から2030年頃までに実用化され、5つの政策目標に寄与すると思われる178個の技術を洗い出し、それぞれの政策目標の達成に寄与する技術別に、分類・整理してリストとして示すとともに、下図のように一次エネルギー／二次エネルギー／最終エネルギー消費のエネルギーの流れ、電気／熱／燃料等のエネルギーの形態、産業／民生／運輸の需要部門別に整理を行い図示した。



○技術ロードマップ

それぞれの政策目標達成に寄与する技術について、技術開発を推進する上で必要な要素技術・課題、求められる機能等の向上、技術開発フェーズの進展等を時間軸上にマイルストーンとして展開した

また、技術スペックの記載にあたっては、分野別推進戦略や他分野のロードマップを参考とした。



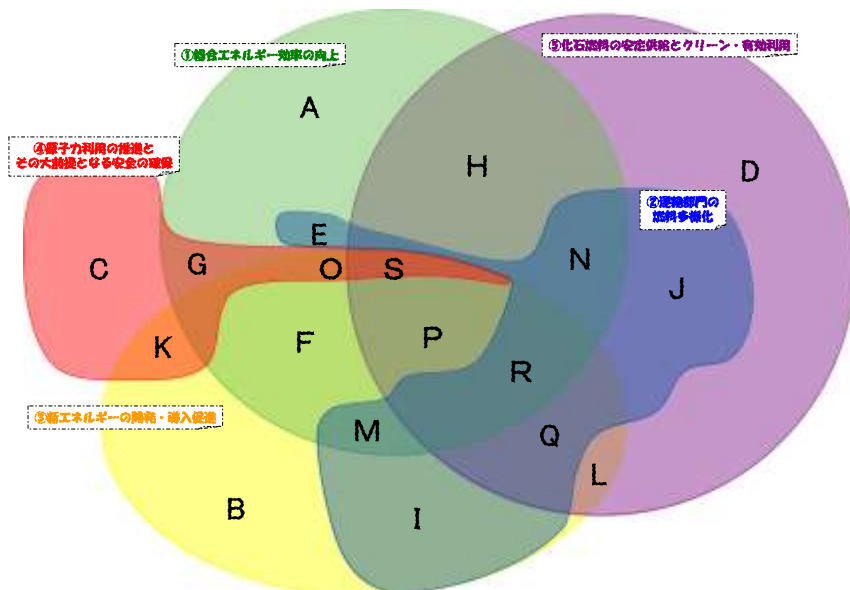
個別技術No. は次の考え方で区分した。

1桁目 : 「新・国家エネルギー戦略」における5つの政策目標のうち一番関連が強い政策目標を表す。

2, 3桁目 : エネルギー技術を指す。

(4桁目 : 個別の番号)

5桁目 : 俯瞰図における位置を指す。



○導入シナリオ

5つの政策目標毎に、国内外の背景、エネルギー政策の動向、主な技術開発及び関連施策、その政策目標を達成するための共通関連施策について整理した。

V. 改定のポイント

- 省エネルギー技術戦略との整合【参考資料：省エネルギー技術戦略2009】
- 既存ロードマップに最新技術を反映
- 個別技術の統廃合（235技術→178技術（新2技術））

VI 政策目標に寄与する技術の

「技術マップ」・「技術ロードマップ」・「導入シナリオ」

i. 総合エネルギー効率の向上

(i-1) 目標と将来実現する社会像

1970年代以来、官民をあげて省エネルギーに取り組み、産業構造の転換や新たな製造技術の導入、民生機器の効率改善等により相当程度の成功を収めてきた。今後約30年においても、「新・国家エネルギー戦略」に掲げるこれまでと同程度の成果（2030年までにGDPあたりのエネルギー利用効率を約30%向上）を実現していくためには、産業部門はもとより、全部門において、総合エネルギー効率の向上に資する技術開発とその成果の導入を促進することが不可欠である。

(i-2) 研究開発の取組み

関連技術を5つ分類した。

- 燃料を省く、または効率的に利用することによる製造プロセスの抜本的な効率化を図るための「超燃焼システム技術」
- 余剰エネルギーを時間的・空間的な制約を超えて利用し、エネルギー需給のミスマッチを解消するための「時空を超えたエネルギー利用技術」
- 生活スタイルの変化に伴う民生部門でのエネルギー消費量の増加に対応し、高効率機器とITとの融合により省エネルギーを図るための「省エネ型情報生活空間創生技術」
- 運輸部門のエネルギー消費量の削減に向け、輸送機器の効率化とモーダルシフト等利用形態の高度化により省エネルギーを図るための「先進交通社会確立技術」
- 幅広い分野で使用される半導体等のデバイスの高性能化により省エネルギーを図るための「次世代省エネデバイス技術」

また、電力貯蔵技術等の電力安定供給に資する技術、送電ロスを大幅に低減する技術等は、「時空を超えたエネルギー利用技術」に分類した。

(i-3) 関連施策の取組み

- 事業者支援補助金による初期需要創出（高効率機器の補助導入など）
- セクター別ベンチマークの導入によるエネルギー消費原単位改善
- 省エネ評価制度の国際的整備
- 国際標準化・規格化による国際競争力の向上
- 国民の省エネルギー意識の高まりに向けた取組

ii. 運輸部門の燃料多様化

(ii-1) 目標と将来実現する社会像

ほぼ100%を石油に依存する運輸部門は、わが国エネルギー需給構造上、最も脆弱性が高く、その需給構造の次世代化は、将来に向けた早急な対策が不可欠な課題となっている。

「新・国家エネルギー戦略」に掲げる目標（2030年に向け、運輸部門の石油依存度が30%程度となることを目指す）の実現のためにも、官民が中長期的な展望・方向性を共有しつつ、技術開発と関連施策を推進していくことが必要である。

(ii-2) 研究開発の取組み

○バイオマス由来燃料

地域における実証的な取組が進みつつあるが、供給インフラの未整備や、燃料利用の際の利便性に関する制約等の課題が存在する。このため、こうした課題の解決に向け、バイオマス由来燃料の導入促進に向けた実証実験の推進や供給インフラの整備に加え、低コストなエタノール製造技術等の技術開発を推進することが必要である。

○天然ガスを起源とするGTL (Gas to Liquid)

ディーゼルエンジンでの活用が可能であり、また、硫黄分等を含まないため環境面で優れた新たな形態の燃料として注目されている。今後、バイオマス由来のBTL (Biomass to Liquid) や石炭由来のCTL (Coal to Liquid) とともに、これら合成液体燃料の製造技術の早期確立を図ることが必要である。

○燃料電池自動車関連

走行距離の拡大、燃料電池本体の抜本的低コスト化や耐久性の向上等の技術の確立とともに、水素供給に係わるインフラの整備及び水素製造、並びにそれらの安全対策の確立が不可欠である。

○電気自動車等

近年急速に普及しているハイブリッド自動車の技術をさらに進め、搭載する電池の性能を向上させることにより、プラグインハイブリッド自動車、さらには電気自動車の技術開発を推進することが必要である。

(ii-3) 関連施策の取組み

○公共的車両への積極的導入

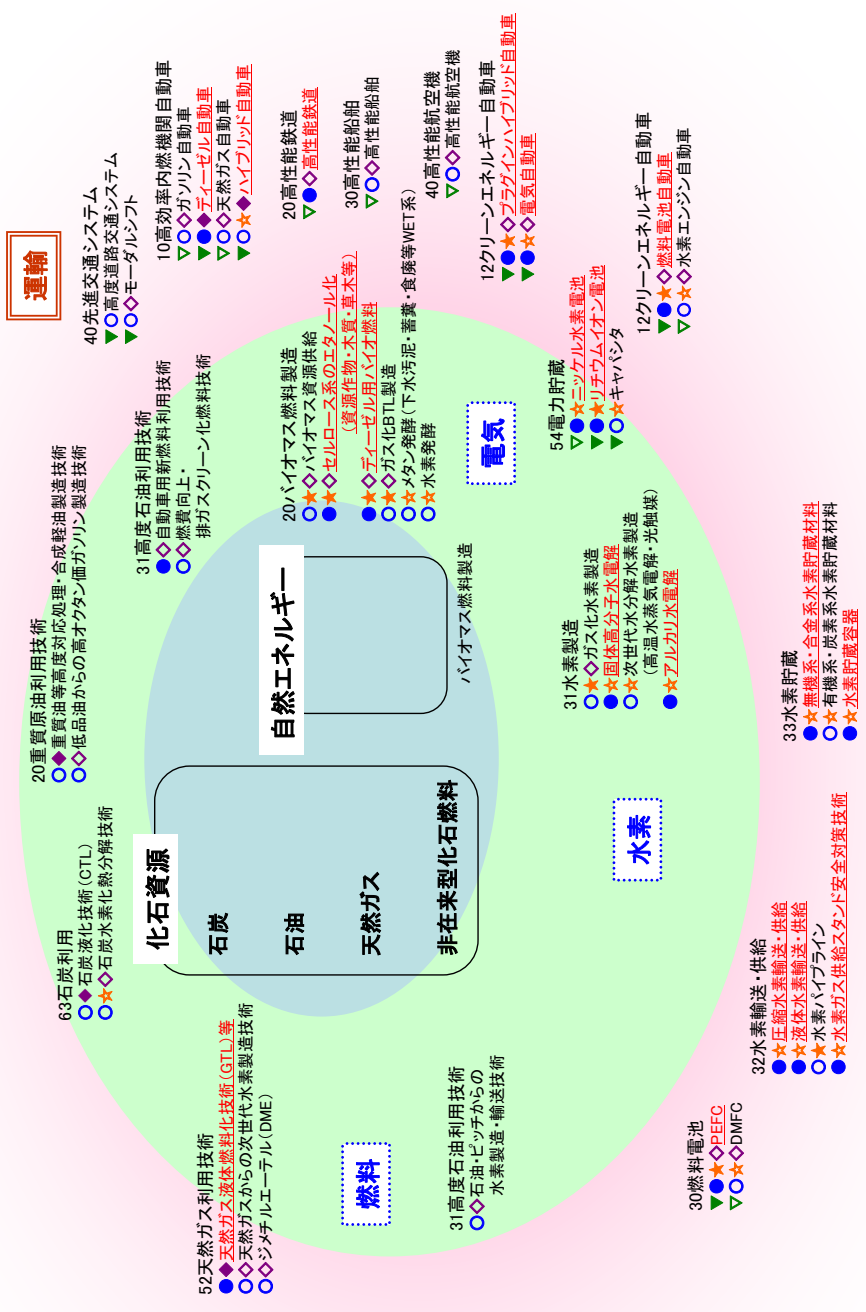
○燃料基準の策定・改定

○アジアにおける新エネルギー協力

○国際標準化による国際競争力向上

(ii-4) 改訂の主たるポイント

- 技術の目的、方向性が同一の技術であるものを統廃合し、45の技術とした。
 - 具体的には、
 - ・「天然ガス等からのLPガス合成技術」は同じ天然ガスからの液化技術である5521「天然ガス液体燃料化技術（GTL）」に統廃合した。
 - ・「LPG/DME混合燃料利用技術」は、同じDMEの製造・利用技術である5524J「ジメチルエーテル（DME）」に統廃合した。
 - ・水素貯蔵材料は、貯蔵メカニズムや水素との反応速度など基礎的なメカニズムが解明され、新材料の開発などのステージにある3331I「無機系・合金系水素貯蔵材料」と、基礎的なメカニズムがまだ完全に解明されていない3332I「有機系・炭素系水素貯蔵材料」に分別した。
 - ・「石油からの水素製造・輸送技術」、 「石油残渣コークス・ピッチからの水素製造・輸送技術」は同じ製油所から副生、製造される水素の製造・輸送技術であることから5311J「石油・ピッチからの水素製造・輸送技術」に統合した。
 - ・船舶管理システムである「高効率海運システム」は、2301N「高性能船舶」に統廃合した。
 - ・「バイオマス等非在来石油高度利用活用技術」、「GTL等新燃料、石油の共利用技術」は、同じ新燃料利用技術であることから5312J「自動車用新燃料利用技術」に統合した。
 - ・「環境負荷低減オフロードエンジン技術」、「自動車燃費向上・排ガスクリーン化燃料技術」は同じクリーン化技術であることから5313J「燃費向上・排ガスクリーン化燃料技術」に統合した。
- 2008年6月の燃料電池・水素ロードマップの改定に伴い、2123S「燃料電池自動車」等の改定を行った。
- 新エネルギーに定義されているクリーンエネルギー自動車（2121S「プラグインハイブリッド自動車」、 「2122S電気自動車」）に、次世代自動車用蓄電池の技術動向を中心に要素技術、マイルストーンの改定を実施した。
- 2101N「ガソリン自動車」、2102N「ディーゼル自動車」に省エネ技術戦略の要素技術を加味すると共に、最新の技術動向を追加した。
- バイオ燃料、GTL等新燃料の混合技術である5312J「自動車新燃料利用技術」は燃料の多様化に欠かせない技術であることから政策寄与度が大きいと思われる技術に位置づけた。



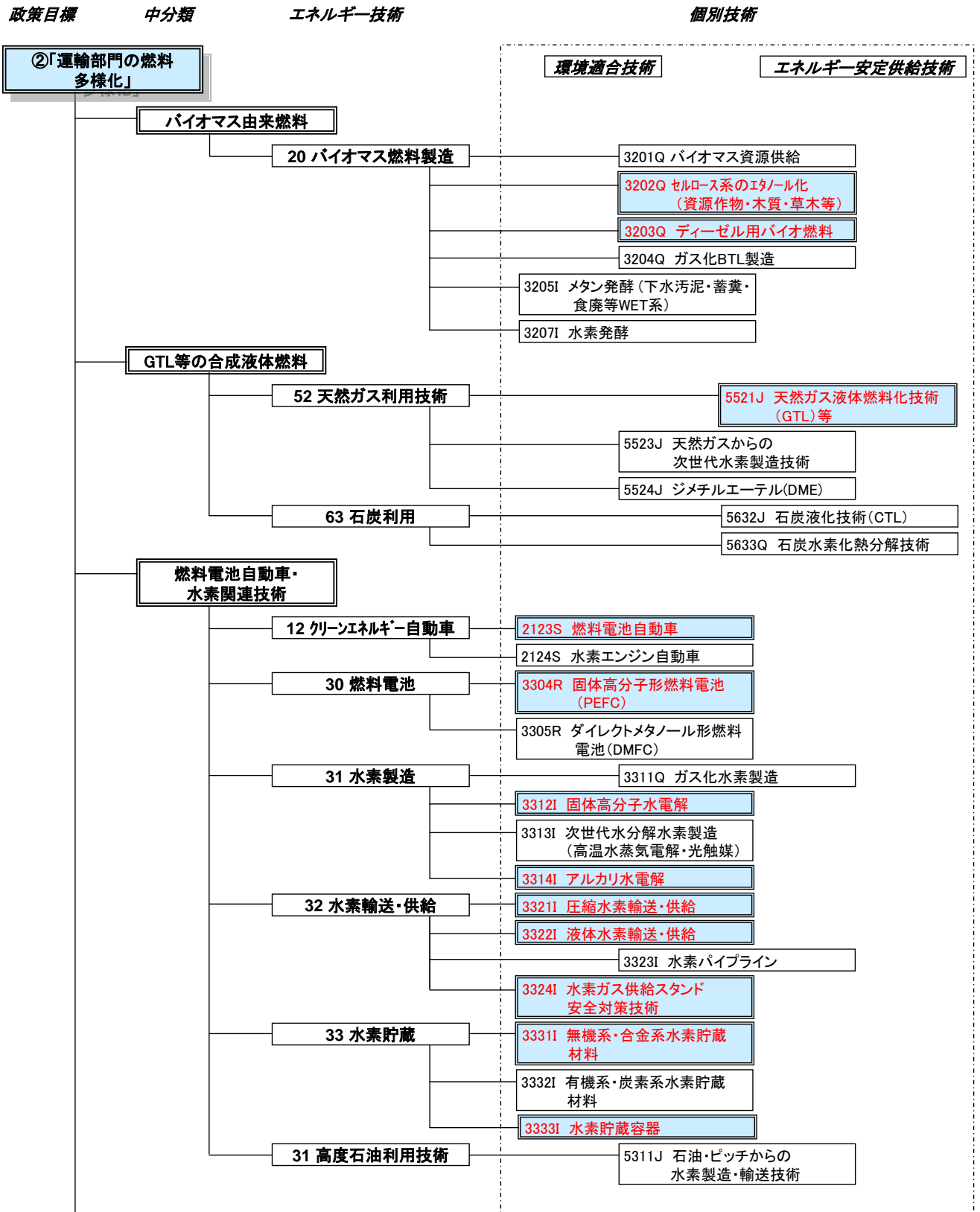
②「運輸部門の燃料多様化」に寄与する技術の技術マップ(整理図)

● 技術名の前に記した色括弧の記号(▽○◇☆◇)は、その技術が寄与する政策目標を示す(▽:総合エネルギー効率の向上、○:運輸部門の燃料多様化、☆:新エネルギーの開発・導入促進、◇:原子力利用の推進とその大前提となる安全の確保、◇:化石燃料の安定供給とクリーン・有効利用)。

● 「運輸部門の燃料多様化」への寄与が大きいと思われる技術名を、色塗りの記号(●、赤字・下線付き)で記載した。

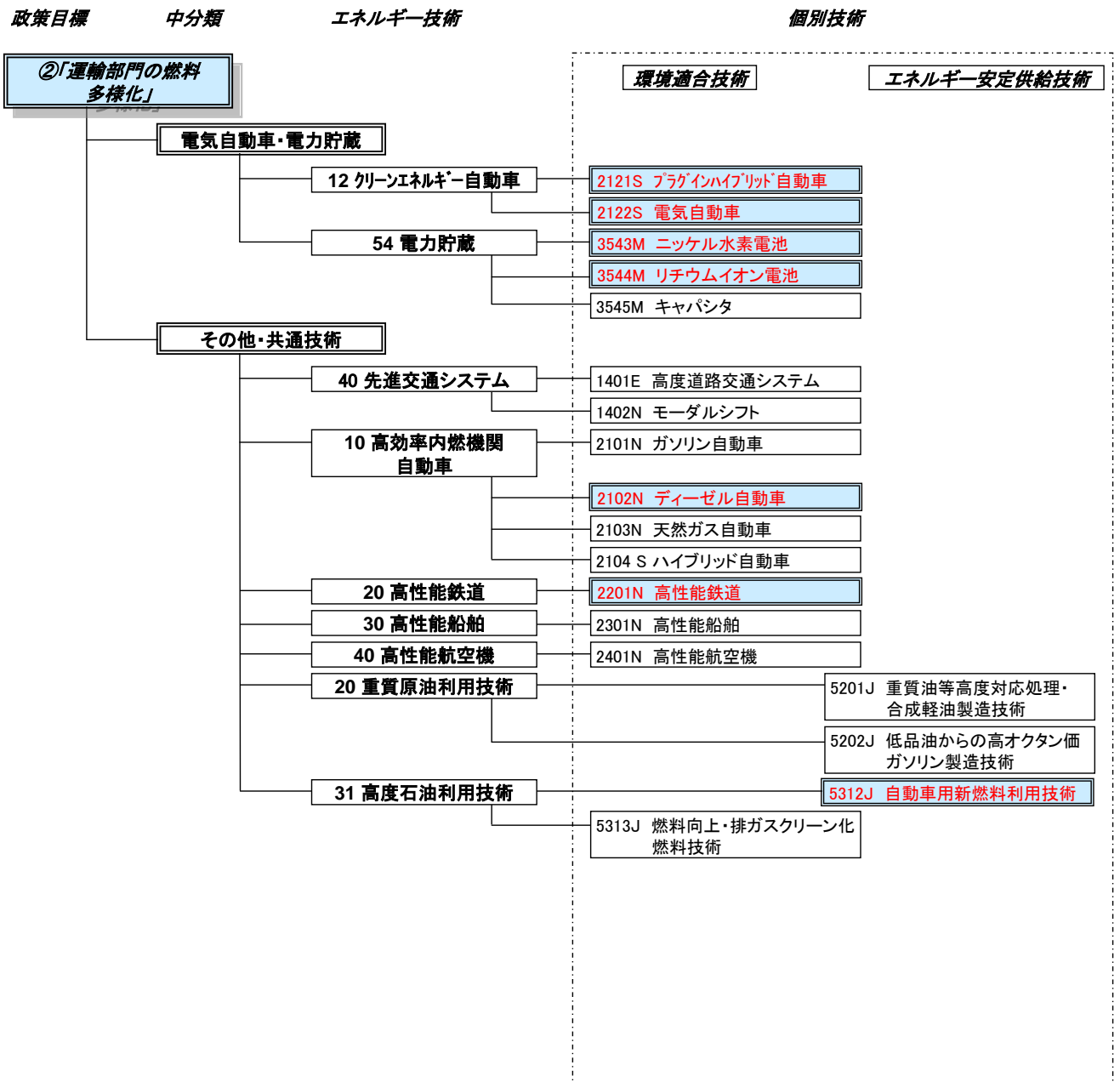
②「運輸部門の燃料多様化」 に寄与する技術の技術マップ(技術リスト)(1/2)

※それぞれの政策目標への寄与が大きいと思われる個別技術を **赤字** で示す。



②「運輸部門の燃料多様化」 に寄与する技術の技術マップ(技術リスト)(2/2)

※それぞれの政策目標への寄与が大きいと思われる個別技術を **赤字** で示す。



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(1/7)

No.	エネルギー技術 個別技術	2010	2015	2020	2025	2030～
3201Q	20.バイオマス燃料製造 バイオマス資源供給					
				バイオマス原料用植物の選抜・育成 遺伝子組み換え技術 栽培技術の開発・実証 収穫・乾燥・圧縮・運搬技術 機器・画像技術の低コスト化 基盤技術(ゲノム情報の整備、ミネラルの回収・再利用技術など)		
3202Q	20.バイオマス燃料製造 セルロース系の エタノール化 (資源作物・木質・ 草木等)	ETBE安全性確認 ETBE導入	100円/L(木質・林地残材等から) 40円/L(資源作物等から)			
				大規模エタノール製造技術 製造コスト低減 糖分解酵素の開発 酵母機能改変等によるバイオプロセス効率化 バイオマス燃料(エタノール)精製処理技術(エタノールの膜分離精製など) バイオマス熱分解液化燃料製造技術		
3203Q	20.バイオマス燃料製造 ディーゼル用バイオ燃料					
				水素化バイオ軽油 地産地消型BDF利用 連続エステル化製造 高品質化・製造コスト削減 グリセリン等バイオプロ有効利用 自動車用バイオマス燃料利用技術 石油とバイオマス燃料の共利用技術		
3204Q	20.バイオマス燃料製造 ガス化BTL製造					
				BTL製造技術 バイオマス/廃棄物ガス化技術 水電解水素による収率向上 低コスト化 効率的廃棄物収集システム		BTL製造効率の向上
3205I	20.バイオマス燃料製造 メタン発酵 (下水汚泥・畜糞・ 食廃等WET系)					
				大規模施設・工場導入 中小規模施設・工場導入 発酵効率向上 可溶性技術 発酵菌改良 プロセス最適化 都市ガスとの混焼		都市ガスへの混合供給 直接燃焼との組合せシステム 下水処理場内の電気・熱利用 設備低コスト化
3207I	20.バイオマス燃料製造 水素発酵					
				嫌気性水素発酵技術 二段発酵(水素+メタン)技術 高効率化・低コスト化		光合成細菌による光水素生産技術 水素生産菌株(高温耐性)探索・育成 高効率フォトバイオリクター 水素発酵微生物の高密度化
5521J	52.天然ガス利用技術 天然ガス液体燃料化 技術(GTL)等					
				パイロットプラント実証 7 bbl/d 500 bbl/d実証 液体燃料(GTL)製造 FT合成技術(コバルト系触媒の高生産、安定的生産) 天然ガス・石炭・CO2等からのLPG合成技術 スケールアップ手法、運転技術 合成ガス製造技術(累積6,600時間の安定的運転)		

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(2/7)

No.	エネルギー技術 個別技術	2010	2015	2020	2025	2030～
5523J	52.天然ガス利用技術 天然ガスからの次世代 水素製造技術	水蒸気改質+PSA	水素透過型メンブリアクタ	CO2分離型水素製造 CO2分離膜		
5524J	52.天然ガス利用技術 ジメチルエーテル(DME)	間接DME合成法	直接DME合成法			
5632J	63.石炭利用技術 石炭液化技術(CTL)	設備規模(国内) 設備規模(中国) 1 t/d試験装置(PSU)(インドネシア)	3,000 t/d 3,000 t/d	6,000 t/d 6,000 t/d		
5633Q	63.石炭利用技術 石炭水素化熱分解技術	実証試験 パイロット試験				
2123S	12.クリーンエネルギー自動車 燃料電池自動車	車両効率(HHV) 約50% 耐久性 3,000時間 始動・作動温度 -30～約90℃ スタック製造原価 約5～6万円/kW	60% 5,000時間 -30～約90-100℃ 約1万円/kW		5,000時間以上 -40～約100-120℃ 約4000円/kW未満	
2124S	12.クリーンエネルギー自動車 水素エンジン自動車	ロータリーエンジン レシプロエンジン		水素直噴・ターボ過給システム		
3304R	30.燃料電池 固体高分子形 燃料電池(PEFC)	発電効率(HHV) 約33% 耐久性 約4万時間	約34% 約4～9万時間		>36% 9万時間	

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(3/7)

No.	エネルギー技術 個別技術	2010	2015	2020	2025	2030～
3305R	30.燃料電池 ダイレクトメタノール形 燃料電池(DMFC)	PC・携帯用 (出力密度(W/kg)、 耐久性(時間)) 小型移動体用 (出力密度(W/kg)、 耐久性(時間))	>15 >1,500時間 >5千時間 >28(低速)、>52(中速・高速) >1,200時間 >1,500時間	>20 >5千時間 >33(低速)、>54(中速・高速) >2,500時間	>40 >1万時間	
		低コスト化 耐久性向上		PC、PDA、携帯用実用化・普及 小型移動体(車いす、スクーター等)実用化・普及 超低クロスオーバー膜 低膨潤膜 高活性触媒		
3311Q	31.水素製造 ガス化水素製造	水素価格(水素製造全体) 150円/Nm ³	80円/Nm ³ 5 t/d パイロットプラント	40円/Nm ³		
		ケミカルループ利用ガス化技術 吸収剤リサイクル技術 部分酸化改質 水蒸気改質 オートサーマル改質		CO ₂ 回収技術		水素分離膜技術
3312I	31.水素製造 固体高分子水電解	電解効率(HHV) 70%(3A/cm ²)・80%(2A/cm ²) 設備費 約1億8千万円/Nm ³ /h(300Nm ³ /h)		75%(3A/cm ²)・85%(2A/cm ²) 約1億2千万円/Nm ³ /h(300Nm ³ /h)		
		セパレータの低コスト化 MEA製造方法改良 高電流密度化によるコンパクト化 酸素過電圧抑制触媒 貴金属削減		更なる低コスト化 耐久性向上		
3313I	31.水素製造 次世代水分解水素製造 (高温水蒸気電解・ 光触媒)					【高温水蒸気電解】 高温水蒸気電解運転圧力の高圧化 高温水蒸気電解大電流密度化技術 インターコネクタ技術 高温水蒸気電解シール技術 【光触媒】 可視光応答型光触媒 格子欠陥の少ない光触媒調製法 活性化エネルギーの低い 水素生成サイトの構築 光触媒反応装置基礎検討
3314I	31.水素製造 アルカリ水電解		設備費 40万円(Nm ³ -H ₂ @500Nm ³ /h)	25万円(Nm ³ -H ₂ @500Nm ³ /h)		
			低コスト化 総合効率の向上 高電流密度化 大型化			
3321I	32.水素輸送・供給 圧縮水素輸送・供給		水素輸送コスト 10円/Nm ³		7円/Nm ³	
		高強度金属材料技術 軽量化 高圧水素圧縮機技術 圧縮効率向上 圧力・容量最適化	高圧水素ディスベンサ技術 高速充填技術 耐久性向上 低コスト化 大型CFRP容器技術 高圧大型圧縮機			
3322I	32.水素輸送・供給 液体水素輸送・供給		水素輸送コスト 6円/Nm ³		3円/Nm ³	
		内槽タンク支持構造技術 タンク断熱法改善 高効率液化システム技術 磁気冷凍技術 液水容器断熱性能向上	液体水素ディスベンサ・流量計技術 耐久性向上 低コスト化			

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)

No.	エネルギー技術 個別技術	2010	2015	2020	2025	2030～
3323I	32.水素輸送・供給 水素パイプライン	<p>パイプラインの技術基準策定 短距離(周辺・家屋)</p> <p>工業用水素輸送</p> <p>炭素鋼鋼管と溶接部の材料検討 施工条件の確立 漏洩検知技術の確立 摺動部・可動部の保持方法・シール材</p> <p>水素配管方法 水素計測技術</p> <p>高圧輸送技術</p> <p>メタン・水素混合輸送・供給</p>				
3324I	32.水素輸送・供給 水素ガス供給スタンド 安全対策技術	<p>基準・規格の見直し 安全性検討と例示規準作成</p> <p>ステーション安全計装システム 高速充填への対応(通信、ブレーク) ポイルオフ低減</p> <p>低コスト化 ステーション総合効率の改善 予防保全システム</p>				
3331I	33.水素貯蔵 無機系・合金系 水素貯蔵材料	<p>【合金系材料】 材料の劣化機構の解明と対策案検証 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</p> <p>合金系材料 無機系材料</p> <p>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</p> <p>【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</p>				
3332I	33.水素貯蔵 有機系・炭素系 水素貯蔵材料	<p>有機系水素貯蔵材料 炭素系水素貯蔵材料</p> <p>【有機系水素貯蔵材料】 高性能水素放出触媒 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</p> <p>【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)</p>				
3333I	33.水素貯蔵 水素貯蔵容器	<p>水素貯蔵容器コスト (車1台あたり)約300～500万円 水素単量 5kg 約5～7kg 約7kg</p> <p>圧縮水素容器 高強度材料 液体水素容器 耐久性向上 ハイブリッド(高圧水素貯蔵材料容器) 軽量・コンパクト化 断熱性能向上</p> <p>～数十万円</p>				
5311J	31.高度石油利用技術 石油・ピッチからの 水素製造・輸送技術	<p>灯油等改質オフサイト水素製造技術 灯油改質等オンサイト水素製造技術 ピッチの粘結材利用技術</p> <p>水素製造触媒技術 水素製造プロセス技術</p> <p>灯油脱硫・改質技術 膜分離技術 自動車オンボード改質技術 水素貯蔵・輸送・供給技術</p> <p>灯油吸着脱硫技術 灯油改質触媒技術 SOFC用熱自立型改質器システム技術 自動車オンボード改質技術</p>				
2121S	12.クリーンエネルギー自動車 プラグインハイブリッド 自動車	<p>バッテリー性能 2,000W/kg 出力密度 1,800W/kg エネルギー 70Wh/kg 密度 コスト 約20万円/kWh 約10万円/kWh</p> <p>100Wh/kg 2,500W/kg 200Wh/kg 約3万円/kWh 約2万円/kWh</p> <p>モータ効率向上 高性能二次電池(高エネルギー密度化・長寿命化・低コスト化) 最適走行制御技術 電力供給システム 小型・軽量化</p>				

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(5/7)

No.	エネルギー技術 個別技術	2010	2015	2020	2025	2030～
2122S	12.クリーンエネルギー自動車 電気自動車	バッテリー性能 エネルギー密度 100Wh/kg コスト 約10万円/kWh 走行距離 80 km(/80kg)	150Wh/kg 約3万円/kWh 120 km(/80kg)	250Wh/kg 約2万円/kWh 200 km(/80kg)		500Wh/kg 約1万円/kWh 400 km(/80kg)
		ハンター性能 一般ユーザー型EV 本格的EV モーター効率向上 高性能二次電池(高エネルギー密度化・長寿命化・低コスト化) 軽量化 電力供給システム パーソナルビークル(コンパクトシティ対応) インホイールモーター				
3543M	54.電力貯蔵 ニッケル水素電池	サイクル寿命 10年 風力・太陽光発電の安定化 ハイブリッド車用				20年
		高出力化 高エネルギー密度化 自己放電特性改善 負荷変動補償				
3544M	54.電力貯蔵 リチウムイオン電池	サイクル寿命 10年 モバイル用 ハイブリッド車用		プラグインハイブリッド車、電気自動車用		20年 革新型蓄電池
		高出力化 高エネルギー密度化 安全性向上 低コスト化 風力・太陽光発電の安定化				
3545M	54.電力貯蔵 キャパシタ	エネルギー密度 4 Wh/kg(モジュール) 出力密度 1.5 kW/kg(モジュール)	20 Wh/kg(デバイス) 10 kW/kg(デバイス)			
		民生用 電力品質維持用 電気二重層キャパシタ エネルギー密度向上 ナノカーボン電極材料 低コスト化 レドックスキャパシタ ハイブリッドキャパシタ 新概念に基づくキャパシタ				
1401E	40.先進交通システム 高度道路交通システム (ITS)	交通流改善技術 ・最適出発時間予測システム(プローブ情報利用) ・異常事態検知システム(プローブ情報利用) プローブ情報利用信号制御		自動運転・隊列走行(高速道路) 信号連携エコドライブ		自動運転・ 協調走行 信号連携グリーンウェアブ走行
		サグ渋滞等対策システム 合流支援システム リアルタイム燃費計 最適経路誘導システム 駐車場対策システム ETC カーナビ活用エコドライブ制御システム VICSシステム エコドライブルート情報システム ナビゲーションシステム				
1402N	40.先進交通システム モーダルシフト	インテリジェント集配システム 汎用標準化送配システム(ICタグの高度利用)		デュアルモードトラック		バイモーダル物流システム(道路→鉄道、船舶)
		新交通システム 軽量軌道交通(LRT) ガイドウェイバス デュアルモードビークル(DMV) コミュニティEVバス 走行車両への給電技術				
2101N	10.高効率内燃機関自動車 ガソリン自動車	バイオマス等代替燃料・混合燃料利用エンジン技術 部分負荷効率向上のための気筒停止 最適傾斜機能鍛造軽量部材		超高強度CFRP製造技術 HCCIエンジン		
		低摩擦材料表面制御 リーンバーン技術 可変圧縮(膨張)比 連続可変バルブ/可変気筒 軽量化 オクタン価向上 MgCo(OH)系利用実証試験 高負荷領域におけるノック抑制				

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(6/7)

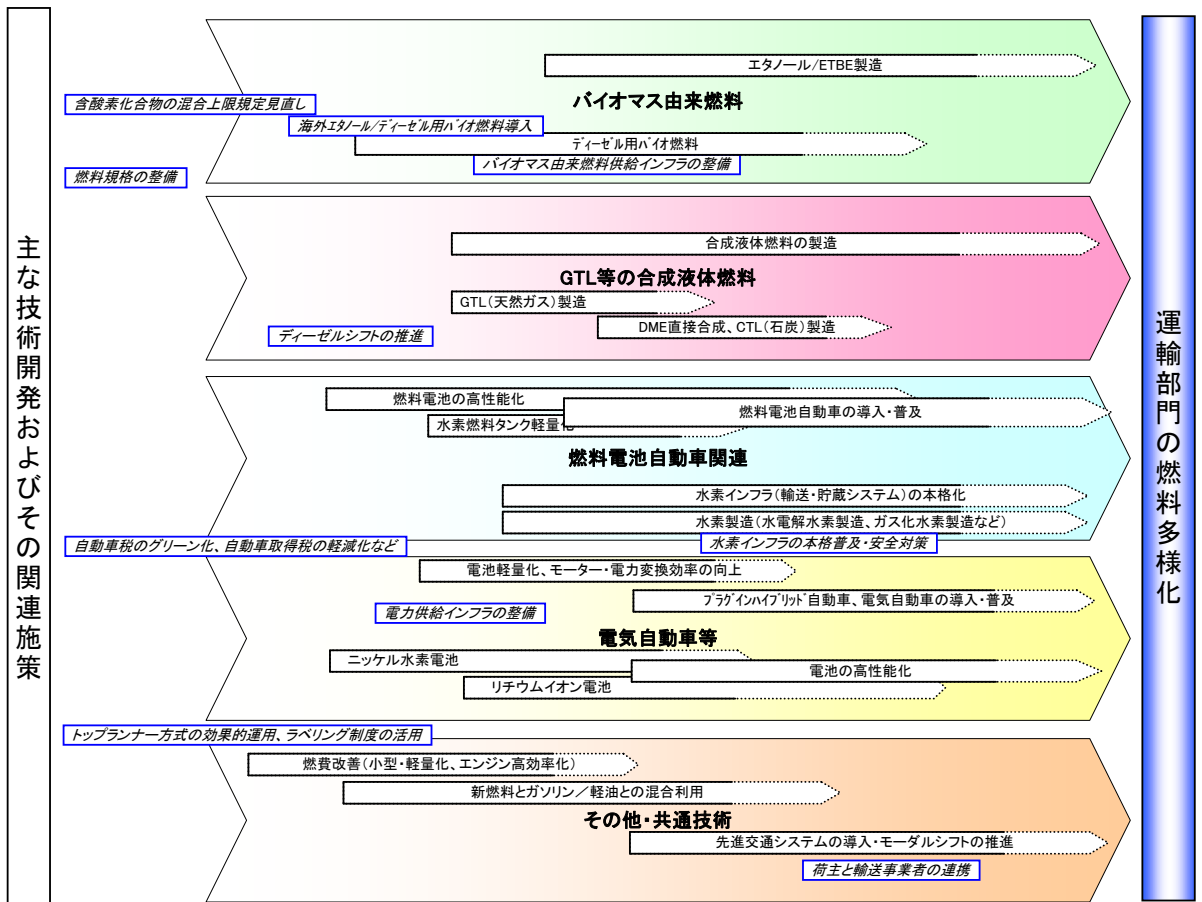
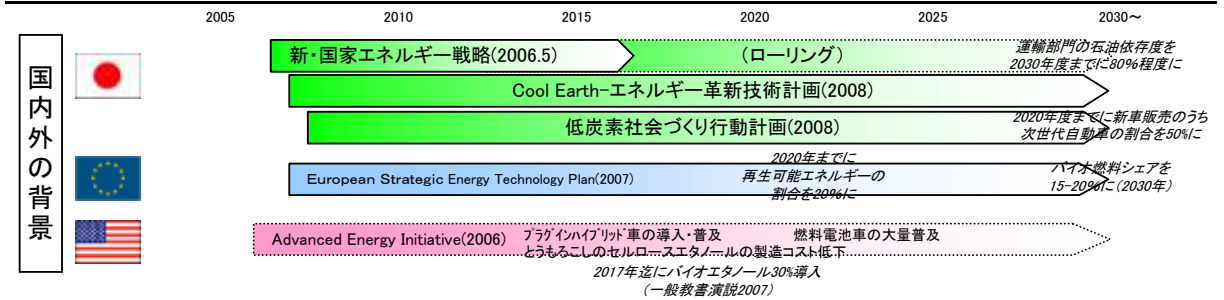
No.	エネルギー技術 個別技術	2010	2015	2020	2025	2030～
2102N	10.高効率内燃機関自動車	バイオマス等代替燃料・混合燃料利用エンジン技術 低エミッション後処理技術(尿素SCRなど) 高効率・低エミッション燃焼技術				
	ディーゼル自動車	HCCIエンジン				
2103N	10.高効率内燃機関自動車	最適傾斜機能鍛造軽量部材 低摩擦材料表面制御				
	天然ガス自動車	超高強度CFRP製造技術 小型・軽量化 乗用車用噴射系の向上(超高压化)・小型高過給化 MgCo(OH)系利用実証試験				
2104S	10.高効率内燃機関自動車	ガソリンとのハイフューエル車 燃料タンクの長寿命化 天然ガス吸蔵材料 MgCo(OH)系利用実証試験				
	ハイブリッド自動車	天然ガスエンジンの高効率化(小型化、ハイブリッド化等) ガス供給インフラの拡充 充填インフラの低コスト化				
2201N	20.高性能鉄道	バッテリー性能 2,000W/kg 出力密度 1,800W/kg コスト 約20万円/kWh 約10万円/kWh				
	高性能鉄道	2,500W/kg 約2万円/kWh 次世代HEV 動力回生システム エンジン効率向上 高性能二次電池(高エネルギー密度化・長寿命化・低コスト化) 低摩擦材料表面制御 軽量化				
2301N	20.高性能船舶	高速鉄道 ハイブリッド鉄道車両				
	高性能船舶	燃料電池鉄道車両 車体軽量化 車体傾斜システム 遺伝アルゴリズムによる空力解析				
2401N	23.高性能船舶	ディーゼル発電/電動モータ推進 電動ポッド推進				
	高性能航空機	航行支援システム 超電導モーター推進船 高信頼度知能化船 陸運との連携 燃料電池 軽量化 排ガス後処理システム エンジン廃熱回収 摩擦抵抗低減技術				
5201J	24.高性能航空機	ハブネットワーク化 船型等省エネ機器技術 性能評価シミュレーション技術				
	20.重質原油利用技術	炭素系複合材利用拡大などによる軽量化 ジェットエンジンの高効率化 更なる省エネ化 環境性、経済性、安全性等の一層の向上				
5201J	重質油等高度対応処理 合成軽油製造技術	HSFCCプロセス開発技術 分解軽油水素化分解触媒技術 重質油からの合成軽油製造技術(ATL)				
		FT合成技術 水素化分解技術 重質油のガス化技術 組成制御型高度石油精製技術 分解ガス成分異性化触媒技術 重質油対応直接脱硫触媒技術 残油分解触媒技術				

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(7/7)

No.	エネルギー技術 個別技術	2010	2015	2020	2025	2030～
5202J	20.重質原油利用技術					
	低品油からの 高オクタン価 ガソリン製造技術	<p>低級ナフサ有効利用技術</p> <p>新規ナフサ異性化触媒技術 高オクタンガソリン製造流動接触分解触媒技術 高オクタンガソリン製造触媒技術</p> <p>高度脱硫(サルファーフリー)技術 ・高度脱硫触媒 ・高度脱硫プロセス</p>				
5312J	31.高度石油利用技術					
	自動車用新燃料 利用技術	<p>バイオ燃料・GTL等新燃料とガソリン・軽油との混合の燃料技術</p> <p>GTLとの混合利用 石炭液化油との混合利用技術 混合燃料対応自動車技術</p> <p>高度脱硫(サルファーフリー)技術 ・高度脱硫触媒 ・高度脱硫プロセス</p>				
5313J	31.高度石油利用技術					
	燃費向上・排ガス クリーン化燃料技術	<p>超低セタン価対応技術 定置式・汎用ディーゼルエンジン用低セタン価燃料開発技術 低セタン価対応エンジン技術</p> <p>最新ディーゼル車対応燃料技術 自動車燃費向上技術 HCCI等の次世代自動車対応燃料技術 アンテック性向上技術</p> <p>高度脱硫(サルファーフリー)技術 ・高度脱硫触媒 ・高度脱硫プロセス</p> <p>燃料多様化対応技術 排ガス等高精度大気シミュレーション技術</p>				

②「輸部門の燃料多様化」に向けた導入シナリオ

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%程度とすることを目指す。



共通関連施策

- 公共的車両への積極的導入
- 燃費基準の策定・改定
- アジアにおける新エネルギー協力
- 国際標準化による国際競争力向上

事前評価書

	作成日	平成19年2月22日
1. 事業名称 (コード番号)	水素貯蔵材料先端基盤研究事業	
2. 推進部署名	燃料電池・水素技術開発部	
3. 事業概要	<p>(1) 概要：本事業では、燃料電池自動車の実用化に向けて重要となる水素貯蔵材料の開発のために、各種実験的検証と計算科学的検証を多角的・融合的に実施することにより、水素貯蔵の基本原理の解明、さらには水素貯蔵能力の革新的向上に必要な条件を明らかにして、開発指針を産業界へ提供することを目指す。</p> <p>(2) 事業規模：平成19年度 7.6億円（100%委託）</p> <p>(3) 事業期間：平成19年度～23年度（5年間）</p>	
4. 評価の検討状況		
<p>(1) 事業の位置付け・必要性</p> <p>本事業は、新エネルギー技術の開発等によってエネルギー供給の安定化・効率化、地球温暖化問題(CO₂)等地球環境問題の解決、新規産業・雇用の創出、水素エネルギー社会の実現等を図ることを目的とする「新エネルギー技術開発プログラム」の一環として実施する。</p> <p>現在、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・貯蔵するための技術として「水素貯蔵材料(水素を吸蔵することが可能な合金等)」が注目を浴びているが、実用化・普及のためには水素吸蔵能力の大幅な性能向上が必要とされている。</p> <p>このような情勢を踏まえ、本事業では各種実験的検証と計算科学的検証を多角的・融合的に実施することにより、水素貯蔵の基本原理の解明、さらには水素貯蔵能力の革新的向上に必要な条件を明らかにして、開発指針を産業界へ提供することを目指す。</p> <p>そして、本事業により得られた成果を水素貯蔵材料の開発指針として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及び将来の燃料電池自動車の実用化・普及を図ることが期待できることから、本事業の必要性は高い。</p>		
<p>(2) 研究目標の妥当性</p> <p>本事業では、水素貯蔵材料の基本原理、さらには水素貯蔵能力の革新的向上に必要な条件を明らかにすることにより、水素をより安全・簡便・効率的かつ低コストに輸送・貯蔵するための技術基盤を確立することを目標としており、妥当である。</p>		

(3) 研究マネジメント

本事業は、水素貯蔵材料に関するトップサイエンティストである独立行政法人産業技術総合研究所エネルギー技術研究部門の秋葉悦男主幹研究員をプロジェクトリーダーに指名し、国内研究機関を結集した緊密かつ柔軟なネットワークを構築することにより、集中的な研究開発を行うことを想定している。また、若手・異分野の研究者の参加を積極的に促すとともに、海外のトップレベルの研究所との共同研究を行うことも想定している。

よって、このようなハイレベルかつ充実した研究体制を構築することにより、水素貯蔵材料の吸蔵能力の大幅な性能向上を図るために必要な効率的かつ効果的な研究マネジメントを実施することができると考えられる。

(4) 研究成果

本事業により得られる、水素貯蔵の基本原理及び水素貯蔵能力の革新的向上に必要な条件などの成果を水素貯蔵材料の開発指針として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及び将来の燃料電池自動車の実用化・普及を図ることが期待できる

(5) 実用化・事業化の見通し

本事業の研究成果を踏まえ、燃料電池自動車用の革新的な吸蔵能力を有する水素貯蔵材料からなる水素貯蔵タンクとしての将来的な実用化・普及が期待される。

(6) その他特記事項

平成18年3月に総合科学技術会議で策定された、第3期科学技術基本計画において、今後重点投資される戦略重点科学技術に、「先端燃料電池システムと安全な革新的水素貯蔵・輸送技術」が選定されている。本事業は、本重点施策に対応した研究開発プロジェクトである。

また、経済成長戦略大綱(2006年7月財政・経済一体改革会議決定)においても、運輸エネルギーの次世代技術開発が重点分野として位置付けられている。

5. 総合評価

本事業は、これまでに実施している水素貯蔵材料開発では解決できていない水素貯蔵の基本原理の解明及び水素貯蔵能力の革新的向上に必要な条件の探索等を行うことにより、燃料電池自動車の実用化に向けたハードルとなっている航続距離等の問題を解決することにつながるものである。

よって、本事業を実施する意義は大きい。



NEDO POST 3 19年度新規研究開発プロジェクト(案) 概要



技術研究機構

水素貯蔵材料先端基礎研究事業

研究目的

○背景・必要性

現在、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・貯蔵するための技術として「水素貯蔵材料(水素を吸蔵することが可能な合金等)」が注目を浴びているが、実用化・普及のためには、水素吸蔵能力の大幅な性能向上が必要とされている。

○目的

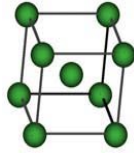
高性能かつ先端的水素貯蔵材料開発に必要な水素貯蔵に関する基本原理の解明及び材料開発への応用技術の基礎研究を幅広い分野で横断的に行い、その成果を先端的材料開発の技術開発指針として産業界へ提供することにより、水業社会の真の実現を目指す。

プロジェクトの規模

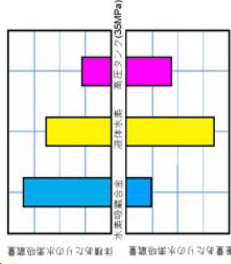
○事業費と研究開発期間(目安として)

平成19年度事業費 7.6億円、事業期間 5年

その他関連図表



結晶構造、ナノ構造、表面構造などの解析と評価(応用技術に必要な知見の基礎的研究)



〔水素貯蔵材料の能力〕

研究内容

○研究開発課題(目的達成のための技術課題)

水素貯蔵材料の貯蔵機構の原理解明
結晶構造、ナノ構造、表面構造などの解析と評価

○キーテクノロジー、ブレークスルーのポイント、オリジナリテイ(課題を解決するためのポイント及びその現状)

「水素貯蔵材料の基本原理の解明」

水素と他の原子・分子との結合様式、結合エネルギー、結晶構造などを基礎的に解明し、新材料設計指針を確立する。

水素化・脱水素化反応時のナノ構造・結晶構造変化、表面状態変化、反応速度等について、最先端の分析装置等を利用して解明する。

「計算科学等材料研究への応用技術の基礎確立」
水素貯蔵材料設計への計算科学的手法の適用を図る。

更に、海外研究機関との国際共同研究を実施する予定。

○目標

水素貯蔵材料の構造解析、貯蔵原理の基礎解明等を実施して、高圧水素貯蔵に比べ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。

ロードマップ上の位置付け

NEDO燃料電池・水素技術開発ロードマップにおける水素貯蔵材料分野において、長期的課題として、水素貯蔵メカニズム解明及び高水素貯蔵材料の構造設計等を位置付けている。

「水素貯蔵材料先端基盤研究事業基本計画（案）」に対するパブリックコメント募集の結果について

平成19年3月22日
NEDO技術開発機構
燃料電池・水素技術開発部

NEDO POST 3において標記基本計画（案）に対するパブリックコメントの募集を行いました結果をご報告いたします。
お寄せいただきましたご意見を検討し、別添の基本計画に反映させていただきました。
みなさまからのご協力を頂き、ありがとうございました。

1. パブリックコメント募集期間

平成19年2月26日～平成19年3月4日

2. パブリックコメント投稿数<有効なもの>

計1件

3. パブリックコメントの内容とそれに対する考え方

ご意見の概要	ご意見に対する考え方	基本計画への反映
全体について		
1. 研究開発の目的		
(1) 研究開発の目的		
(2) 研究開発の目標		
(3) 研究開発の内容		

[意見1] (1件)

『基本計画案』において、「研究開発の目標」は「水素貯蔵材料の構造解析、貯蔵原理の基礎解明等を実施して、高圧水素貯蔵よりコンパクトで効率的な材料の開発指針を提供する」となっています。また、『プロジェクト(案)概要』の中では、「研究開発課題」として「貯蔵機構の原理解明」と「結晶構造、ナノ構造、表面構造などの解析と評価」の2つが挙げられています。

しかしながら、『(別紙)研究開発計画』の中の「研究開発の具体的内容」には、これらに必ずしも則していない部分が見受けられます。例えば、項目1の金属系材料の基礎研究の内容として挙げられている、「革新的材料の合成」、「合成・探索に必要な革新的手法の開発」、「システム設計に必要な物性値の評価」などは、ここで課題として挙げられている「貯蔵機構の原理解明」や「構造解析」の内容とは言えないのではないのでしょうか。これら内容はむしろ、将来的に本プロジェクトの成果を活用して材料探索やシステム設計を実施する際に必要なものであり、ここに含めるのは適当でないと思います。

また、研究課題には「構造の解析・評価」が明確に挙げられているにもかかわらず、研究内容にはそれらは明らかに書かれていません。(もちろん、水素の存在位置の解明などは、構造解析の一部にあたるのでしょうか)水素貯蔵材料の反応機構を考える上で、構造評価は不可欠なものと考えられます。特に金属系材料に関しては、結晶構造および局所構造、水素化に伴う構造変化や欠陥の生成などが機構解明に関する重要な知見になると考えられますので、これらの評価を研究の中心的内容として盛り込むべきであると考えます。

種々の先端的手法を用いて詳細な構造・特性の情報を得た上でそれらを統合的に解釈し、場合によっては計算的手法とも組み合わせることにより、初めて「貯蔵原理の解明」が実現するのではないのでしょうか。そのためには、これまで水素貯蔵材料にはあまり用いられなかった手法を適用したり、既存の方法をさらに高度化してより詳細な観測ができるようにするなど、測定手法の開発・高度化のような観点も必要になってくると思います。特に、反応機構の解明のためには、水素吸蔵・放出反応の過程、あるいはその途中の状態をその場観察できるような手法の開発が重要であると考えます。

[考え方と対応]

水素貯蔵材料先端基盤研究事業の目的・目標に照らして当を得たご意見であり、研究開発の具体的内容を見直させていただきます。

[反映の有無と反映内容]

基本計画5ページの下記部分を変更し、ご意見を反映しました。

(別紙)研究開発計画

2. 研究開発の具体的内容

① 金属系水素貯蔵材料の基礎研究

金属系材料の結晶構造、局所構造、欠陥構造等の様々なスケールに対応した構造解析、および材料中の水素の存在位置、存在状態等の解明を行う。また、金属系材料に特有な結合状態や水素の格子中での位置に関する情報を得るためにin situ (その場観察)測定が可能な手法の開発を進め、水素吸蔵機構の基本原則を解明する。

2. 研究開発の実施方式		
(1) 研究開発の実施体制		
(2) 研究開発の運営管理		
3. 研究開発の実施期間		
4. 評価に関する事項		
5. その他重要事項		
その他		

以上

特許論文リスト

特許【全3件】 平成20年度【2件】

(非金属系G:広島大学)

※詳細は非公開情報

平成21年度【1件】

(非金属系G:広島大学)

※詳細は非公開情報

論文・雑誌等掲載【全59件】 平成19年度【6件】

(非金属系G:広島大学)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2008/2	学術論文 Thermochimica Acta, 468, 35 (2008)	Evaluation of enthalpy change due to hydrogen desorption for lithium amide/Imide system by differential scanning calorimetry	S. Isobe T. Ichikawa K. Tokoyoda N. Hanada H.Y. Leng Y. Kojima H. Fujii

(非金属系G:北海道大学)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2007/10/15	Advanced Materials Research, vol. 26-28, 877-880, 2007	Development of Environmental Cell for Gas Reaction of Nano-size Particles	K. Okudera K. Hamada T. Suda N. Hashimoto S. Ohnuki

(材料物性G:日本原子力研究開発機構)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2007/12/31	誌上发表 水素エネルギーシステム Vol. 32, No.4 (2007), pp. 14-19.	放射光を利用した水素貯蔵材料研究の可能性と最近の研究成果	町田 晃彦 青木 勝敏

(計算G:産業技術総合研究所、物質・材料研究機構)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2008/3/16	Advances in Computational Engineering and Sciences (Proceedings of ICCES'08), p.331-388 (2008)	Structural Stability of Hydrogen Storage Materials	M.Katagiri H. Onodera H. Ogawa N. Nishikawa

(中性子G:高エネルギー加速器研究機構)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2008/2	結晶学会誌 2月号	高強度全散乱装置の概要と水素 吸蔵材料研究	大友 季哉 鈴谷 賢太郎
2008/2	プラズマ・核融合学会誌 第84巻 第6号	パルス中性子を用いた構造解析 の最前線	社本 真一 神山 崇 福永 俊晴 樹神 克明 大友 季哉 鈴谷 賢太郎

平成20年度【38件(G内での重複除く)】

(金属系 G:産業技術総合研究所)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2009/2/1	NUCLEAR INSTRUMENTS & METHODS IN PHYSICS RESEARCH SECTION A-ACCELERATORS SPECTROMETERS DETECTORS AND ASSOCIATED EQUIPMENT 誌上発表	Distribution of Hydrogen in Metal Hydrides Studied by In situ Powder Neutron Diffraction	中村 優美子 中村 仁 岩瀬 謙二 秋葉 悦男

(非金属系 G:広島大学)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2008/9	学術論文 J. Appl. Phys., 104, 053511 (2008).	Characterization of hydrogen absorption/desorption states on lithium-carbon-hydrogen system by neutron diffraction	H. Miyaoka K. Itoh T. Fukunaga T. Ichikawa Y. Kojima H. Fuji
2008/8	学術論文 炭素, 46, 1628 (2008)	Hydrogenation properties of lithium intercalated graphite	W. Ishida H. Miyaoka T. Ichikawa Y. Kojima
2009/1	学術論文 JOURNAL OF APPLIED PHYSICS 105, 023527 (2009)	Thermodynamic properties of lithium amide under hydrogen pressure determined by Raman spectroscopy	S. Hino N. Ogita M. Udagawa T. Ichikawa Y. Kojima
2008/6	学術論文 Phys. Rev. B 77, 235114/1-7 (2008)	Theoretical analysis of X-ray absorption spectra of Ti compounds used as catalysts in lithium amide/imide reactions	T. Tsumuraya T. Shishidou T. Oguchi

2008/12	学会誌 水素エネルギーシステム Vol.33, No.4, 49 (2008)	燃料電池自動車用水素貯蔵技術の 現状と将来展望	小島 由継
2008/12	学会誌 水素エネルギーシステム Vol.33, No.4, 20 (2008)	アンモニアを利用した水素貯蔵・ 輸送	小島 由継 坪田 雅己 市川 貴之
2008/7	業界専門誌 工業材料 2008年7月号 Vol.56 No.7	マグネシウムの水素吸蔵・放出技 術と応用性	市川 貴之 小島 由継
2009/3	学術論文 J. Phys.: Condens. Matter 21, 185501(2009)	Ab initio study on the electronic structure and vibration modes of alkali and alkaline-earth amides and alanates	T.Tsumuraya T. Shishidou T. Oguchi

(非金属系 G:上智大学)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2008	プロシーディング Mater. Res. Soc. Symp. Proc. Volume 1042E, 104 2-S03-11.	Hydrogen Degradation Property of Electrochem ically Charged Aluminu m	Hiroshi Suzuki Daisuke Kobayashi Kenichi Takai Yukito Hagihara

(材料物性 G:日本原子力研究開発機構)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2008/7/31	誌上発表 Journal of Physics: Conf erence Series, Vol. 121 (2008), p. 042011.	Raman and Visible Absorptio n Study of ScH ₃ at high pre ssure	久米 徹二 大浦 裕之 竹市 知生 佐々木 重雄 清水 宏晏 大村 彩子 町田 晃彦 綿貫 徹 青木 勝敏 竹村 謙一
2008/10/1	誌上発表 波紋 (日本中性子科学会誌) Vol. 18, No. 4 (2008), p p. 214-219.	研究用原子炉 JRR-3 に設置の 中性子粉末回折装置の現状と将 来	深澤 裕 大山 研司

2008/10/17	誌上発表 Applied physics letters, Vol. 93, No. 15 (2008), p. 151918.	Formation and decomposition of AlH ₃ in the aluminum-hydrogen system	齋藤 寛之 町田 晃彦 片山 芳則 青木 勝敏
2009/2/20	誌上発表 高圧力の科学と技術（日本 高圧力学会誌） Vol. 19, No. 1 (2009), pp. 24-30.	水素貯蔵材料の高圧中性子散乱 実験	町田 晃彦 大友 季哉 服部 高典 深澤 裕
2009/3/15	誌上発表 Journal of Surface Analysis, Vol. 15, No. 3 (2009), pp. 303-306.	Synchrotron Radiation Photoemission Spectroscopy for Native Oxide Layer on Vanadium and VCrTa	寺岡 有殿 吉越 章隆 ハリーズ・ジェ ームズ
2009/3/4	誌上発表 Applied Surface Science, Vol. 255, No. 13-14 (2009), pp. 6710-6714.	Hydrogen desorption from a diamond-like carbon film by hyperthermal atomic oxygen exposures	K. Yokota M. Tagawa A. Kitamura K. Matsumoto A. Yoshigoe Y. Teraoka

(材料物性 G:兵庫県立大学)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2008/9/12	誌上発表 Japanese Journal of Applied Physics, 47(9) 7464-7466.	Effects of annealing on material characteristics of diamond-like carbon film formed by focused-ion-beam chemical vapor deposition	神田 一浩 井垣 潤也 西窪 明彦 米谷 玲皇 鈴木 常生 新原 皓一 斎藤 秀俊 松井 真二
2008/10/30	誌上発表 Diamond and Related Materials, 18(2-3), 490-492.	Graphitization of thin films formed by focused-ion-beam chemical-vapor-deposition	神田 一浩 山田 倫子 岡田 真 井垣 潤也 米谷 玲皇 松井 真二

2009/3/20	誌上発表 Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 48, No. 5 (2009), p.055505.	Photoemission Study of Hydrogenated Amorphous Carbon Thin Films as a Function of Annealing Temperature	Yuichi Haruyama Masahito Tagawa Kumiko Yokota Shinji Matsui
-----------	---	--	--

(材料物性 G:神戸大学)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2009/3/4	誌上発表 Applied Surface Science, Vol. 255, No. 13-14 (2009), pp. 6710-6714.	Hydrogen desorption from a diamond-like carbon film by hyperthermal atomic oxygen exposures	Kumiko Yokota Masahito Tagawa Akira Kitamura Koji Matsumoto Akitaka Yoshigoe Yuden Teraoka

(材料物性 G:岐阜大学)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2008/7/31	誌上発表 Journal of Physics: Conference Series, vol. 121, 42011 (2008).	Raman and Visible Absorption Study of ScH ₃ at high pressure	T. Kume T. Takeich S. Sasaki H. Shimizu A. Ohmura A. Machida T. Watanuki K. Aoki K. Takemura

(材料物性 G:東北大学)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2009/1/2	誌上発表 J. Am. Chem. Soc., <u>131</u> (2009) 894-895.	Halide-Stabilized LiBH ₄ , a Room-Temperature Lithium Fast-Ion Conductor	H. Maekawa M. Matsuo H. Takamura M. Ando Y. Noda T. Karahashi S. Orimo

(計算G:産業技術総合研究所 計算科学研究部門)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2008/6	Clean Technology Conference Technical Proceedings, p.306-309 (2008)	Structural Stability of Hydrogen Storage Materials	M. Katagiri H. Onodera H. Ogawa
2008/8	Mater. Trans., Vol.49 No.9 p.1983-1986 (2008)	Parameter Physics on Hydrogen Storage by Classical Molecular Dynamics Method	H. Ogawa A. Tezuka H. Wang T. Ikeshoji M. Katagiri
2008/10	Proceedings of Fourth International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2008), p.559-562 (2008)	Structural Stability of Hydrogen Storage Materials	M. Katagiri H. Onodera H. Ogawa
2009	誌上発表 Int. J. Nanoscience (Proceedings of AsiaNANO 2008), 8, 39-42.,in press	Molecular Dynamics Simulation on Hydrogen Storage in Metallic Nanoparticles	H. Ogawa A. Tezuka H. Wang T. Ikeshoji M. Katagiri
2009	誌上発表 Int. J. Nanoscience (Proceedings of AsiaNANO 2008),), 8, 49-52.,in press	First principles analysis on hydrogen hopping in LaNi ₅	A. Tezuka H. Wang H. Ogawa T. Ikeshoji
2009	誌上発表 Int. J. Nanoscience (Proceedings of AsiaNANO 2008), in press	Electronic and Crystal Structural Changes in bcc Type Hydrogen Storage Materials	Y. Tanaka M. Katagiri H. Onodera H. Ogawa
2009	誌上発表 Int. J. Nanoscience (Proceedings of AsiaNANO 2008), in press	Reconstruction of Pressure-Composition-Tem perature Curves of RNi ₅ (R = La, Pr, Nd, And Sm) Hydrogen Storage Materials by Computer	T. Vasileios M. Katagiri H. Onodera H. Ogawa

		Simulation	
2009	誌上発表 Int. J. Nanoscience (Proceedings of AsiaNANO 2008), in press	Molecular Dynamics Study of Structural Stability of Hydrogen Storage Materials	M. Katagiri H. Onodera H. Ogawa
2009	誌上発表 Proceedings of 2008 MRS Fall Meeting, accepted.	Structural Stability by Hydrogenation in Hydrogen Storage Materials	M. Katagiri H. Onodera H. Ogawa

(計算G:物質・材料研究機構)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2008/8/13	誌上発表 Materials Transactions, Vol.49, NO.9, 1983-1986 (2008)	Parameter Physics on Hydrogen Storage by Classical Molecular Dynamics Method	H.Ogawa A.Tezuka H.Wang T.Ikeshoji M.Katagiri
2008/6/1	誌上発表 Proceedings of Nanotech nology 2008, CDROM, 2 008.	Computer Simulation of Hydrogen Storage Materials	M.Katagiri H.Onodera H.Ogawa
2008/10/27	誌上発表 Proceedings of Fourth I nternational Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2008), C DROM, 2008.	Structural Stability of Hydrogen Storage Materials	M.Katagiri H.Onodera H.Ogawa
accepted	誌上発表 International Journal of Nanoscience	Molecular Dynamics Simulation on Hydrogen Storage in Metallic Nanoparticles	H.Ogawa A.Tezuka H.Wang T.Ikeshoji M.Katagiri
accepted	誌上発表 International Journal of Nanoscience	Reconstruction of Pressure-Composition-Temper ature Curves of RNi_5 (R = La, Pr, Nd, And Sm) Hydrogen	V.Tserolas M.Katagiri H.Onodera H.Ogawa

		Storage Materials by Computer Simulation	
accepted	誌上発表 International Journal of Nanoscience	Electronic and Crystal Structural Changes in bcc Type Hydrogen Storage Materials	Y.Tanaka M.Katagiri H.Onodera H.Ogawa
accepted	誌上発表 International Journal of Nanoscience	Molecular Dynamics Study of Structural Stability of Hydrogen Storage Materials	M.Katagiri H.Onodera H.Ogawa
accepted	Proceedings of 2008 MR S Fall Meeting	Computer Simulation of Stru ctural Stability by Hydrogen ation in Hydrogen Storage M aterials	M.Katagiri H.Onodera H.Ogawa

(計算G:東北大学 金属材料研究所)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2008/11/14	誌上発表 J. Phys. Chem. C. 112 (2008) 19676-19679.	Hydrogen Adsorption on Lithium-Functionalized Calixarenes: A Computational Study	V.Natarajan Sathiyamoorthy R.Sahara H.Mizuseki Y.Kawazoe
2008/11/3	誌上発表 International Journal of Nanoscience, 8 (2009) 57-63.	Thermodynamics and hydrogen storage ability of binary hydrogen + help gas clathrate hydrate	V.Belosludov O.Subbotin R.Belosludov H.Mizuseki Y.Kawazoe J.Kudoh
2009/4/7	誌上発表 Chem. Phys. 359 (2009) 173-178	First-principles study of hydrogen storage over Ni and Rh doped BN sheets	V.Natarajan Sathiyamoorthy M.Khazaei R.Sahara H.Mizuseki Y.Kawazoe
2009/4/14	誌上発表 International Journal of Molecular Sciences, 10 (2009) 1601-1608	DFT Study on the Role of Metal Centers in Li-Functionalized MOF's in Hydrogen Storage	V.Natarajan Sathiyamoorthy R.Sahara H.Mizuseki

			Y.Kawazoe
--	--	--	-----------

(中性子G:高エネルギー加速器研究機構)

	掲載誌	タイトル	著者
2009/2	高圧の科学と技術 第19巻 第1号 (2009)	水素貯蔵材料の高圧中性子散乱実験	町田 晃彦 大友 季哉 服部 高典 深沢 裕
2009/3	日本結晶学会誌 第51 巻第1 号 (2009)	J-PARC 中性子全散乱装置によるナノ構造材料探査	大友 季哉

平成21年度【15件(G内での重複除く)】

(金属系 G:産業技術総合研究所)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2009/4/	Special issue of Nanotechnology on 'Nanoscale Phenomena in Hydrogen Storage' 誌上発表	The nanostructure and hydrogenation reaction of Mg50Co50 BCC alloy prepared by ball-milling	松田 潤子 Shao Huaiyu 中村 優美子 秋葉 悦男
2009/4/	JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS 誌上発表	Behavior of vacancy formation and recovery during hydrogenation cycles in LaNi _{4.93} Sn _{0.27}	榊 浩司 伊達 亮介 水野 正隆 荒木 秀樹 中村 優美子 白井 泰治 Robert C. Bowman 秋葉 悦男
2009/4/	JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 誌上発表	Structural Study of La ₄ MgNi ₁₉ Hydride by In situ X-ray and Neutron Powder Diffraction	中村 仁 岩瀬 謙二 早川 博 中村 優美子 秋葉 悦男
2009	日本伝熱学会 誌上発表	水素の貯蔵輸送と水素貯蔵材料	秋葉 悦男

(非金属系 G:広島大学)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2009/4	学術論文 Nanotechnology 20 , 204021 (2009)	Reaction process of hydrogen absorption and desorption on nano-composite of hydrogenated graphite and lithium hydride	H. Miyaoka T. Ichikawa Y. Kojima
2009/5	学術論文 J. Phys. Chem. C. 113 , 5409 (2009)	An Electron Spin Resonance Investigation of Hydrogen Absorption in Ball-milled Graphite	C. Smith H. Miyaoka T. Ichikawa M. Jones J. Harmer

			W. Ishida P. Edwards Y. Kojima
印刷中	学術論文 Journal of Materials Research,	Molecular Hydrogen Carrier with Activated Nano-Hydride and Ammonia,	Y. Kojima K. Tange S. Hino S. Isobe M. Tsubota K.Nakamura M. Nakatake H. Miyaoka H.Yamamoto T. Ichikawa
投稿中	学術論文 日本金属学会誌（投稿中）	電解チャージにより水素吸蔵し た純アルミニウムにおける水素 存在状態と引張特性に与える水 素の影響	鈴木 啓史 小林 大輔 花田 信子 高井 健一 萩原 行人

(材料物性 G: 日本原子力研究開発機構)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2009/4/17	Applied physics letters, Vol. 94, No. 15 (2009), p.151915.	Hydrogenation of passivated aluminum with hydrogen fluid	H. Saitoh A. Machida Y.Katayama K. Aoki
2009/5/29	Applied Physics Express, Vol. 2, No. 6 (2009), p.066022.	Atomic Layer Fluorination of Highly Oriented Pyrolytic Graphite using Hyperthermal Atomic Fluorine Beam	M.Tagawa K.Yokota K.Maeda A.Yoshigoe Y.Teraoka
投稿中		Development of an energy domain synchrotron radiation 57Fe-Mössbauer spectrometer and its application to ultrahigh-pressure study with a diamond anvil cell	T. Mitsui N. Hirao Y. Ohishi R. Masuda Y. Nakamura H. Enoki K. Sakakie M. Seto

(材料物性 G:神戸大学)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2009/5/29	Applied Physics Express, Vol. 2, No. 6 (2009), p.066022.	Atomic Layer Fluorination of Highly Oriented Pyrolytic Graphite using Hyperthermal Atomic Fluorine Beam	M.Tagawa K.Yokota K.Maeda A.Yoshigoe Y.Teraoka

(材料物性 G:高輝度光科学研究センター)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
投稿中		Development of an energy domain synchrotron radiation ^{57}Fe -Mössbauer spectrometer and its application to ultrahigh-pressure study with a diamond anvil cell	T. Mitsui N. Hirao Y. Ohishi R. Masuda Y. Nakamura H. Enoki K. Sakakie M. Seto
投稿中		High-pressure synthesis and characterization of new platinum hydride	N. Hirao H. Fujihisa Y. Ohishi H. Orita K. Takemura T. Kikegawa

(計算G:産業技術総合研究所 計算科学研究部門)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2009/6/16	Applied Physics Express (submitted)	Theoretical Study of Phonon and Thermodynamic Properties of Hydrogen Storage $\alpha\text{-LaNi}_5\text{H}$	Masahiko Katagiri Shigeki Saito Hiroshi Ogawa Vasileios Tserolas
2009/6/30	Journal of Physics Condensed Matter (submitted)	First-principles study on hydrogen vacancy in sodium alanate with Ti substitution	Hao Wang Akinori Tezuka, Hiroshi Ogawa Tamio Ikeshoji

(計算G:物質・材料研究機構)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2009/6/16	Applied Physics Express (submitted)	Theoretical Study of Phonon and Thermodynamic Properties of Hydrogen Storage a-LaNi ₅ H	Masahiko Katagiri Shigeki Saito Hiroshi Ogawa Vasileios Tserolas

(中性子 G:高エネルギー加速器研究機構)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2009	日本金属学会誌 (投稿中)	高強度全散乱装置 NOVA	大友 季哉

口頭発表・ポスター発表・講演【全458件】 平成19年度【80件(G内での重複除く)】

(金属系G:産業技術総合研究所)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2007/6/13	NEDO 水素技術開発シンポジウム 講演	水素貯蔵材料先端基盤研究事業の研究開発構想(平成19年度新規事業の紹介)	秋葉 悦男
2007/7/11	Gordon Research Conference 講演	Observation of Defect Structure in NaAlH ₄ during the Decomposition Process	榊 浩司 Meredith T. KUBA 中村 優美子 Craig M. JENSEN 秋葉 悦男
2007/7/11	Gordon Research Conference ポスター発表	Redistribution of Hydrogen Occupation and Lattice Relaxation Observed in LaNi _{4.78} Sn _{0.22} Dx using in situ Neutron Powder Diffraction Technique.	中村 優美子 R. C. Bowman, Jr. 秋葉 悦男
2007/7/24	2007 Annual Meeting of American Crystallographic Association 講演	In situ Powder Diffraction Studies of Metal Hydrides for Hydrogen Storage	中村 優美子 秋葉 悦男
2007/7/25	福岡水素エネルギー戦略会議記念講演会 講演	水素貯蔵材料研究開発の目指すものと現状	秋葉 悦男
2007/8/1	FCH 基盤技術懇談会 講演	水素貯蔵輸送技術の現状と展開	秋葉 悦男
2007/8/23	第2回水素若手研究会 講演	水素貯蔵材料の構造解析	中村 優美子
2007/8/30	経済産業省産業技術環境局と産業技術総合研究所の意見交換会 講演	水素貯蔵材料研究における国際研究協力	秋葉 悦男

2007/9/3	METI-RIETI-AIST-NEDO Symposium グローバルエコノミー下における今後の科学技術協力 講演	Collaboration on Advanced Hydrogen Storage Materials	秋葉 悦男
2007/9/4	水素・燃料電池関連独立行政法人産業技術総合研究所合同シンポジウム 講演	水素貯蔵材料先端基盤研究事業	秋葉 悦男
2007/9/6	First Polish Forum Fuel Cells and Hydrogen Technologies 講演	Japanese R & D Projects on Hydrogen Storage Materials	秋葉 悦男
2007/10/7	7th NSF-MEXT Joint Symposium Fuel Cell and Related Technologies 講演	Nano and Crystal Structures of Hydrogen Storage Materials	秋葉 悦男 榊 浩司 浅野 耕太 中村 優美子
2007/10/17	MH 利用開発研究会平成19年度シンポジウム 講演	粉末回折法で見た水素貯蔵材料の水素吸蔵・放出反応	中村 優美子
2007/10/24	2007 水素エネルギー協会特別講演会 講演	水素の貯蔵・輸送その課題と展望	秋葉 悦男
2007/10/30	The 2nd LANL-AIST-NEDO Workshop on Fuel Cell and Hydrogen 講演	Advanced Fundamental Research Project on Hydrogen Storage Materials- Project and Collaboration -	秋葉 悦男
2007/11/2	1st AIST-LANL Seminar on Hydrogen Storage Materials 講演	Overview of Hydrogen Storage Research at AIST	秋葉 悦男
2007/11/2	1st AIST-LANL Seminar on Hydrogen Storage Materials 講演	Structural Studies of Metal Hydrides for Hydrogen Storage	中村 優美子
2007/11/12	CAS-AIST-NEDO Workshop 2007 on Fuel Cell & Hydrogen 講演	Introduction of 'Advanced Fundamental Research Project on Hydrogen Storage Materials'	秋葉 悦男

2007/11/16	日本太陽エネルギー学会第 12回研究講演会 講演	水素吸蔵合金による水素の貯 蔵・輸送	秋葉 悦男
2007/11/17	陽電子ビームの形成と理工 学への応用 講演	錯体型水素貯蔵材料 NaAlH_4 の水素貯蔵・放出特性改善に 対する Ti 添加の影響	榊 浩司 Meredith T. KUBA 中村 優美子 白井 泰治 Craig M. JENSEN 秋葉 悦男
2007/11/22	第5回産業技術総合研究所 水素エネルギーシンポジウ ム 講演	水素貯蔵材料の挑戦	秋葉 悦男
2007/11/26	MRS 2007 Fall Meeting 講演	Positron lifetime study of the lattice defect formation by hydrogenation in Ti-based BCC alloys	榊 浩司 岩瀬 謙二 中村 優美子 白井 泰治 秋葉 悦男
2007/11/26	MRS 2007 Fall Meeting 講演	Crystal structures and hydrogenation behaviors of the RMn_n ($3 \leq n < 5$) “superlattice” alloys	秋葉 悦男 Chai Yujin 中村 仁 岩瀬 謙二 榎 浩利 榊 浩司 浅野 耕太 中村 優美子
2007/11/26	MRS 2007 Fall Meeting 講演	Phase transformation and Structural properties of $\text{La}(\text{Ni}_{5-x}\text{Co}_x)$ hydrides	中村 優美子 秋葉 悦男
2007/11/28	日本中性子科学会 第7回 年会 ポスター発表	La-Mg-Ni 系水素吸蔵合金水 素化物の結晶構造の in situ 粉 末中性子回折	中村 仁 岩瀬 謙二 早川 博 中村 優美子 秋葉 悦男
2008/1/28	中性子科学会 第4期大 型施設供用問題特別委員会	材料分野から J-PARC への期 待	秋葉 悦男

	第2回 会合 講演		
2008/2/26	The 3rd Japan-China Seminar on Hydrogen Storage Materials 講演	Fundamental Research on Hydrogen Storage Materials (HYDRO☆STAR)	秋葉 悦男
2008/2/27	国際水素貯蔵フォーラム 2008 講演	Introduction of Fundamental Research on Hydrogen Storage Materials (HYDRO☆STAR)	秋葉 悦男
2008/2/27	国際水素貯蔵フォーラム 2008 講演	金属系水素貯蔵材料の特性を 理解するための構造解析から のアプローチ	中村 優美子
2008/2/29	FC EXPO 2008 専門技術 セミナー 講演	水素貯蔵材料の課題と研究開 発の方向	秋葉 悦男
2008/3/7	International Symposium on Pulsed Neutron and Muon Sciences (IPS 08) 講演	Distribution of Hydrogen in Metal Hydrides Studied by In situ Powder Neutron Diffraction	中村 優美子 中村 仁 岩瀬 謙二 秋葉 悦男
2008/3/27	日本化学会第 88 春季年会 (2008) 講演	水素貯蔵材料の研究の現状と 展望	秋葉 悦男

(非金属系G: 広島大学)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2007/9/21	口頭発表 日本物理学会第62回年次 大会	第一原理分子動力学法による'ナ ノ構造化グラファイト中の水素・炭化 水素の結合状態	原田 晶子 下條 冬樹 香山 正憲 星野 公三
2007/10/17	口頭発表 MH利用開発研究会 平 成19年度シンポジウム	触媒添加したマグネシウムの 水素吸蔵反応速度	木村 通 磯部 繁人 日野 聡 市川 貴之 小島 由継

2008/2/27	口頭発表 国際水素貯蔵フォーラム 2008	Basic Research of Nano-Composite Materials for Hydrogen Storage	小島 由継
2008/2/26	口頭発表 The 3rd Japan-China Seminar on Hydrogen Storage Materials	Characterization of Nano-Composite Materials for Hydrogen Storage	小島 由継
2008/3/28	口頭発表 日本金属学会2008年春季 大会	軽元素系水素貯蔵物質の電子状態と振動モード	圓谷 貴夫 獅子堂 達也 小口 多美夫
2008/3/28	口頭発表 日本金属学会2008年春季 大会	軽元素系水素貯蔵物質単結晶の調製とその特性	磯部 繁人 坪田 雅己 市川 貴之 小島 由継
2008/3/28	口頭発表 日本金属学会2008年春季 大会	Li-C-H系物質の水素吸蔵/放出サイクルに伴う特性変化	宮岡 裕樹 市川 貴之 小島 由継
2008/3/28	口頭発表 日本金属学会2008年春季 大会	ミリング処理によって合成したリチウム・炭素層間化合物の水素化特性	石田 渉 宮岡 裕樹 市川 貴之 小島 由継
2008/3/28	口頭発表 日本金属学会2008年春季 大会	高活性マグネシウムの水素吸蔵反応における律速段階	木村 通 磯部 繁人 日野 聡 市川 貴之 小島 由継

(非金属系G:北海道大学)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2007/11/8	口頭発表 PRICM6, Jeju, Korea	In-situ High-resolution Observation for Decomposition of NaAlH ₄ .	H. Kawasaki S. Ohnuki T. Suda N. Hashimoto Y. Kojima
2007/11/8	口頭発表 PRICM6, Jeju, Korea	Development of Environmental Cell for Gas Reaction of Nano-size Particles	K. Okudera K. Hamada T. Suda, N. Hashimoto S. Ohnuki Y. Kojima

2008/1/11	口頭発表 Joint Symposium on Advances in Electron Microscopy for Materials Characterization, Sapporo,	Environmental Cell technique in Electron Microscopy	S. Ohnuki
2008/1/22	口頭発表 Norway-Japan Workshop, Hiroshima Univ.	TEM Observation by the Environmental Cell	S. Ohnuki
2008/2/22	口頭発表 産業技術総合研究所水素材料先端科学研究センター特別講演, 九州大学	環境セル電顕法による水素吸蔵材料の研究	大貫 惣明

(非金属系G:上智大学)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2007/9/19	口頭発表 日本金属学会2007年秋季大会	純Alの水素脆化に及ぼす水素存在状態とひずみ速度依存性	鈴木 啓史 高井 健一 萩原 行人 小林 大輔
2007/11/27	ポスター発表 2007 MRS Fall Meeting	Hydrogen Degradation Property of Electrochemically Charged Aluminum	H. Suzuki D. Kobayashi K. Takai Y. Hagihara
2008/3/26	口頭発表 日本金属学会2008年春季大会	弾性・塑性応力下におけるTi水素化物の室温水素放出挙動	鈴木 啓史 高井 健一 萩原 行人 谷口 尚史 桐原 望

(材料物性G:日本原子力研究開発機構)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2007/9/24	口頭発表 日本物理学会第62回年次大会	希土類金属二水素化物の圧力誘起分解現象	町田 晃彦 大村 彩子 綿貫 徹 青木 勝敏
2007/10/31	口頭発表 Workshop on Fuel Cell Performance Improvement & Hydrogen Storage Materials	Study of the Structural and Electronic Properties of Hydrides using Synchrotron Radiation Source at SPring-8	町田 晃彦
2007/11/21	口頭発表	YH ₂ の圧力誘起分解現象	町田 晃彦

	第48回高圧討論会		綿貫 徹 大村 彩子 青木 勝敏
2008/1/8	口頭発表 SPring-8利用者懇談会 地球 惑星科学研究会・高圧物質科 学研究会2007年度合同研究 会合	金属水素化物に特異な構造 転移、不均化反応	町田 晃彦 綿貫 徹 大村 彩子 青木 勝敏 竹村 謙一
2008/1/11	口頭発表 International Workshop on Structural Analyses Bridging over between Amorphous and Crystalline Materials (SABAC2008)	Advanced Research on Metal Hydrides using Synchrotron Radiation in SPring-8	町田 晃彦 青木 勝敏
2008/2/13	口頭発表 「水素製造・輸送・貯蔵シス テム等技術開発」に関するワ ークショップ	水素貯蔵材料先端基盤研究 事業の進捗状況及び当該分 野における今後の研究課題	青木 勝敏
2008/3/25	口頭発表 日本物理学会第63回年次大会	液体金属水素化物の構造	片山 芳則 齋藤 寛之 青木 勝敏

(材料物性G:高輝度光科学研究センター)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2007/11/21	ポスター発表 第48回高圧討論会	白金水素化物の形成と相転 移メカニズム	平尾 直久 藤久 裕司 大石 泰生 竹村 謙一 亀卦川 卓美

(材料物性G:岐阜大学)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2007/9/21	口頭発表 AIRAPT-21 and 45th EHPRG International Conference	Raman and optical absorption studies of rare-earth hydrides under high pressure	久米 徹二 清水 宏晏 町田 晃彦 綿貫 徹 青木 勝敏

2007/11/21	口頭発表 第 48 回高圧討論会	高圧力下におけるスカンジウム水素化物のラマン散乱	久米 徹二 清水 宏晏 町田 晃彦 綿貫 徹 青木 勝敏
2007/12/15	口頭発表 関西・中部誘電体セミナー	金属水素化物の超高圧振動分光による水素のふるまいと高圧相転移	久米 徹二 清水 宏晏

(材料物性G: 東北大学 特定領域研究推進支援センター)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2007/9/19	口頭発表 日本金属学会 2007 年秋期大会	高圧合成された Mg-Y 系水素化物の高温 NMR 分光	高村 仁 片岡 理樹 前川 英己 岡田 益男
2008/3/27	口頭発表 日本金属学会 2008 年春期大会	高圧合成された Mg-Y 系水素化物の局所構造解析	高村 仁 片岡 理樹 黒須 慶太 野田 泰斗 前川 英己 岡田 益男

(計算科学G: 産業技術総合研究所 計算科学研究部門)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2008/3/17	口頭発表 International Conference on Computational & Experimental Engineering and Sciences, Hawaii	Structural Stability of Hydrogen Storage Materials	M.Katagiri H. Onodera H. Ogawa N. Nishikawa
2008/3/27	口頭発表 日本金属学会 2008 年春期大会 (東京)	水素貯蔵材料の構造安定性	片桐 昌彦 小野寺 秀博 小川 浩
2008/3/27	口頭発表 日本金属学会 2008 年春期大会 (東京)	古典分子動力学法による水素貯蔵材料に関するパラメータ・フィジックス	小川 浩 手塚 明則 王 昊 池庄司 民夫 片桐 昌彦

(計算科学G:物質・材料研究機構)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2008/2/29	口頭発表 FC EXPO 2008 第4回国際水素・燃料電池展 専門技術セミナー (東京)	計算科学とアニメーション で描く水素と材料の世界	片桐 昌彦
2008/3/17	口頭発表 International Conference on Computational & Experimental Engineering and Sciences, Hawaii	Structural Stability of Hydrogen Storage Materials	M.Katagiri H. Onodera H. Ogawa N. Nishikawa
2008/3/27	口頭発表 日本金属学会 2008 年春期大 会 (東京)	水素貯蔵材料の構造安定性	片桐 昌彦 小野寺 秀博 小川 浩
2008/3/27	口頭発表 日本金属学会 2008 年春期大 会 (東京)	古典分子動力学法による水 素貯蔵材料に関するパラメ ータ・フィジックス	小川 浩 手塚 明則 王 昊 池庄司 民夫 片桐 昌彦

(計算科学G:東北大学 金属材料研究所)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2007/9/15	招待講演 The 4th Asian Consortium for Computational Materials Science (ACCMS-4)	Accurate Description of the Physical and Chemical Properties of Hydrogen Hydrates: Possible Application as Energy Storage	R. Belosludov
2007/10/31	Workshop on Fuel Cell Performance Improvement & Hydrogen Storage Materials (LANL-NEDO-AIST(FC-Cu bic))	Accurate Description of the Physical and Chemical Properties of Hydrogen Hydrates: Possible Application as Energy Storage	H. Mizuseki
2007/11/28	口頭発表 MRS 2008 Fall	Physical and Chemical Properties of Hydrogen Clathrate Hydrate:	R. Belosludov O. Subbotin H. Mizuseki

		Theoretical Aspects of Energy Storage Application	V. Belosludov Y. Kawazoe
2008/1/26	招待講演 The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)	Theory of Hydrogen Hydrates with Hexagonal Structure	V. Belosludov O. Subbotin R. Belosludov H. Mizuseki Y. Kawazoe
2008/1/26	ポスター発表 The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)	A First Principles Study on Mechanical and Electronic Properties in Metal Hydrides	R. Sahara B. Tuchiya H. Mizuseki S. Nagata T. Shikama Y. Kawazoe
2008/1/26	ポスター発表 The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)	Role of Guest Size on CS-I or CS-II Hydrate Formation	O. S. Subbotin V. R. Belosludov R. V. Belosludov P. M. Rodger H. Mizuseki Y. Kawazoe
2008/3/27	口頭発表 日本金属学会	Hydrogen Dissociation on Platinum Clusters: A Theoretical Study	M. Khazaei V. Kumar M. S. Bahramy A. Ranjbar H. Mizuseki Y. Kawazoe
2008/3/27	口頭発表 日本金属学会	First-principles Calculations of Hyperfine Structure in M doped S16H16 Fullerene Cages: M = Cr, Mn, and Fe	M. S. Bahramy V. Kumar M. Khazaei A. Ranjbar
2008/3/27	口頭発表 日本金属学会	Phase Diagram of Hydrogen Clathrate	R. Belosludov 水関 博志

		Hydrate: Application for Hydrogen Storage	川添 良幸 O. Subbotin V. Belosludov
2008/3/27	口頭発表 日本金属学会	Ti, Zr, Hf 水素化物の弾性特性に関する理論研究	佐原 亮二 土屋 文 水関 博志 永田 晋二 四竈 樹男 川添 良幸

(中性子G:高エネルギー加速器研究機構)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2007/11/31	口頭発表 Workshop on Fuel Cell Performance Improvement & Hydrogen Storage Materials (LANL-NEDO-AIST(FC-Cubic))	Total Neutron Diffractometer for Research on Advanced Hydrogen Storage Material	大友 季哉
2008/1/11	口頭発表 International Workshop on Structural Analyses Bridging over between Amorphous and Crystalline Materials (SABAC2008)	High Intensity Total Diffractometer at J-PARC	大友 季哉 鈴谷 賢太郎 三沢 正勝
2008/1/11	口頭発表 International Workshop on Structural Analyses Bridging over between Amorphous and Crystalline Materials (SABAC2008)	Structure of Hydrogen Storage Amorphous Materials	福永 俊晴
2008/3/6	ポスター発表 International Symposium on Pulsed Neutron and Muon Sciences at J-PARC 2008 (IPS 08)	Overview of the High Intensity Total diffractometer at J-PARC	大友 季哉 鈴谷 賢太郎 三沢 正勝 金子 直勝 福永 俊晴 伊藤 恵司 杉山 正明 森 一広

			亀田 恭男 社本 真一 高田 慎一 中谷 健 吉田 亨次 山口 敏男 川北 至信 丸山 健二 神山 崇 佐藤 節夫 鈴木 次郎 武藤 豪 清水 裕彦 安芳 次 宇野 彰二 田中 真伸
--	--	--	--

平成20年度【290件(G内での重複除く)】

(金属系G:産業技術総合研究所)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2008/4/14	ノースフォーラム「高度化水素マテリアル研究会」 講演	水素貯蔵材料のこれからを占う	秋葉 悦男
2008/5/13	American Conference on Neutron Scattering (ACNS) 2008 ポスター発表	Local Structure of Mg ₅₀ Co ₅₀ Hydrogen Storage Alloy by Neutron Powder Diffraction	中村 仁 Shao Huaiyu 松田 潤子 Thomas Proffen 中村 優美子 秋葉 悦男
2008/5/23	第2回 HERMES, HRPD 合同ユーザーズミーティング 講演	金属系水素貯蔵材料の貯蔵原理の解明を目指した構造解析からのアプローチ	中村 優美子
2008/6/6	燃料電池周辺材料・技術の進展 講演	水素の貯蔵輸送の課題と展望	秋葉 悦男
2008/6/27	International symposium on metal-hydrogen systems ポスター発表	Transmission electron microscopic studies on ball-milled Mg-Co alloy	松田 潤子 Shao Huaiyu 中村 優美子 秋葉 悦男
2008/6/27	International Symposium on Metal Hydrogen Systems ポスター発表	Phase transformation of La ₂ Ni ₇ H _x studied by in-situ X-ray diffraction	岩瀬 謙二 榊 浩司 中村 優美子 秋葉 悦男
2008/6/28	International Symposium on Metal Hydrogen Systems 講演	Vacancy Formation-Relaxation during Hydrogenation and Dehydrogenation in LaNi _{4+x} Cu (x=0, 1)	榊 浩司 中村 優美子 白井 泰治 秋葉 悦男
2008/6/28	International Symposium on Metal Hydrogen Systems 講演	Crystal Structure and Hydrogenation Properties of La ₄ MgNi ₁₉	中村 優美子 中村 仁 岩瀬 謙二 早川 博 秋葉 悦男

2008/7/1	The Ny-Alesund Symposium 2008 講演	Hydrogen on board storage for mobile applications	秋葉 悦男
2008/7/10	"2008 DOE Annual Merit Review"報告会 講演	DOE Hydrogen & Fuel Cell Program 2008 Annual Merit Review Meeting 報告会水素貯蔵(化学水素化物および吸着材料を中心として)	秋葉 悦男
2008/8/27	福岡水素エネルギー人材育成センター第一回高度人材育成 講演	水素貯蔵材料研究の最前線	秋葉 悦男
2008/9/9	Workshop on Fuel Cell Performance Improvement & Hydrogen Storage Materials 講演	Hydrogen Overview and LANL-AIST collaboration	秋葉 悦男
2008/9/10	2008 LANL-AIST-NEDO Fuel Cell & Hydrogen Storage Workshop 講演	Characterization of Mg-Co alloy and hydride using TEM and neutron total scattering	中村 優美子 中村 仁 松田 潤子 Shao Huaiyu 秋葉 悦男
2008/9/24	日本金属学会 2008 年度秋期大会 講演	LaNi ₅ 基合金の水素吸蔵放出反応と転位形成	松田 潤子 榊 浩司 中村 優美子 秋葉 悦男
2008/9/24	日本金属学会 2008 年度秋期大会 講演	Ti ₄₅ Cr ₂₅ Mo ₃₀ BCC 合金の空孔による残留水素の捕獲現象	榊 浩司 松田 潤子 中村 優美子 秋葉 悦男
2008/9/24	日本金属学会 2008 年度秋期大会 講演	Mg ₅₀ Co ₅₀ 水素吸蔵合金における粉末中性子回折を用いた局所構造解析	中村 仁 Shao Huaiyu 松田 潤子 Hyunjeong Kim Thomas Proffen 中村 優美子 秋葉 悦男

2008/9/24	日本金属学会 2008 年度秋期大会 講演	(La, Mg) _x Ni _y (x/y = 2/7, 5/19)合金および水素化物の結晶構造と水素化特性	中村 優美子 岩瀬 謙二 中村 仁 秋葉 悦男
2008/9/24	日本金属学会 2008 年度秋期大会 講演	β-VHx および β-V _{0.9} Mo _{0.1} Hx 中の水素の in-situ NMR 測定	浅野 耕太 林 繁信 中村 優美子 秋葉 悦男
2008/9/25	2008 International Fuel Cell Symposium 講演	On board hydrogen storage for mobile application	秋葉 悦男
2008/10/8	IEA HIA Task 22 expert meeting 講演	Characterization of Mg-Co alloy and hydride using TEM and neutron total scattering	中村 優美子 松田 潤子 中村 仁 Shao Huaiyu 秋葉 悦男
2008/11/5	AsiaNANO 2008 講演	Hydrogenation and structures of MgCo BCC alloys prepared by ball milling	秋葉 悦男 Shao Huaiyu 松田 潤子 中村 仁 浅野 耕太 中村 優美子
2008/11/11	第 2 回水素エネルギー利用開発研究会 講演	水素貯蔵技術の現状と将来	秋葉 悦男
2008/12/1	Materials Research Society 2008 Fall Meeting 講演	Crystal Structures and Hydrogenation Behaviors of the RMn (3<n<5) (R=La, Mg; M=Ni, Co) "Superlattice" Alloys	秋葉 悦男 中村 仁 岩瀬 謙二 Chai Yujin 榎 浩利 榊 浩司 浅野 耕太 中村 優美子
2008/12/6	京都大学原子炉実験所専門研究会 「陽電子科学とその理工学への応用」 講演	Ti ₄₅ Cr ₂₅ Mo ₃₀ BCC 合金の水素吸蔵に伴う格子欠陥形成と空孔による残留水素の捕獲	榊 浩司 松田 潤子 中村 優美子 秋葉 悦男

2009/1/13	第1回先端水素貯蔵材料研究 交流会 講演	金属系水素貯蔵材料の水素 吸蔵・放出反応に伴う構造変 化の解析	中村 優美子
2009/2/24	水素貯蔵材料フォーラム 2009 講演	水素貯蔵材料先端基盤研究 事業の進捗と連携の推進	秋葉 悦男
2009/3/26	Seminar on Hydrogen Storage Materials 講演	Overview of HYDRO-STAR Project	秋葉 悦男
2009/3/26	Seminar on Hydrogen Storage Materials 講演	Structure and Properties of Hydrogen Storage Alloys	中村 優美子
2009/3/30	日本金属学会 2009 年春期大 会 講演	(Mg, Ca)Ni ₂ ラーベス相合金 と水素化物の中性子全散乱 測定	中村 優美子 中村 仁 秋葉 悦男 寺下 尚克 Hyunjeong Kim Thomas Proffen
2009/3/30	日本金属学会 2009 年春期大 会 講演	粉末中性子回折と放射光粉 末 X 線回折を用いた Mg ₅₀ Co ₅₀ 水素吸蔵合金の局 所構造解析	中村 仁 Shao Huaiyu 松田 潤子 中村 優美子 秋葉 悦男 Hyunjeong Kim Thomas Proffen
2009/3/30	日本化学会第 89 春季年会	バナジウム重水素化物の ¹ H および ² H MAS NMR スペ クトル	林 繁信
2009/3/30	日本金属学会 2009 年春期大 会 講演	LaNi ₅ 系金属間化合物の水 素吸蔵放出反応と転位形成	松田 潤子 中村 優美子 秋葉 悦男
2009/3/30	日本金属学会 2009 年春期大 会 講演	La ₂ Ni ₇ 合金の水素化特性と in situ X 線回折による結晶 構造	岩瀬 謙二 榊 浩司 中村 優美子 秋葉 悦男

(非金属系 G:広島大学)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2008/6/15-19	口頭発表 17 th World Hydrogen Energy Conference "Hydrogen Distribution and Storage"(Australia)	Ammonia as Hydrogen Storage Media	T. Ichikawa K. Tange S. Hino Y. Kojima
2008/6/23-28	口頭発表 MH 2008 (Iceland)	Novel Hydrogen Storage System with Metal Hydride and Ammonia	Y. Kojima S. Hino C. Oomatsu K. Tange T. Ichikawa
2008/6/23-28	ポスター発表 MH 2008 (Iceland)	Reaction between Ammine Complex Compound and Metal Hydride	M. Tsubota C. Oomatsu S. Hino H. Fujii M. Yamana T. Ichikawa Y. Kojima
2008/6/23-28	ポスター発表 MH 2008 (Iceland)	Identification of Catalyst in the Li-N-H System by X-ray Absorption Spectroscopy	S. Isobe S. Hino T. Ichikawa Y. Kojima
2008/6/23-28	口頭発表 MH 2008 (Iceland)	Kinetic Improvement of the Li-Mg-N-H System	Y. Wang T. Ichikawa S. Isobe M. Tsubota S. Hino T. Nakagawa Y. Kojima
2008/6/23-28	口頭発表 MH 2008 (Iceland)	Thermal Decomposition Properties of Ammonia Borane with Metal Hydride	Md. R. Matin T. Ichikawa S. Isobe C.Z. Wu Y. Kojima
2008/6/23-28	ポスター発表 MH 2008 (Iceland)	Hydrogen Absorption and Desorption Properties of	H. Miyaoka T. Ichikawa

		Lithium-Carbon-Hydrogen System	Y. Kojima
2008/6/23-28	ポスター発表 MH 2008 (Iceland)	NH ₃ Pressure-Composition Isotherms of Metal Amides	S. Hino T. Ichikawa Y. Kojima
2008/6/23-28	ポスター発表 MH 2008 (Iceland)	Hydrogen storage properties on Sc- <i>M</i> B-H (<i>M</i> = Mg, Ca) systems	T. Nakagawa T. Ichikawa Y. Kojima
2008/6/23-28	ポスター発表 MH 2008 (Iceland)	Ab-initio Study on Vibration Modes of Amides and Alanates	T. Tsumuraya T. Shishidou T. Oguchi
2008/6/23-28	ポスター発表 MH 2008 (Iceland)	X-ray Absorption Spectra of Ti Catalysts in Lithium Amide/Imide Reactions: A First-principles Study	T. Tsumuraya T. Shishidou T. Oguchi
2008/6/23-26	口頭発表 NEDO平成19年度成果報告シンポジウム (東京)	NEDO水素貯蔵材料先端基盤研究事業非金属系水素貯蔵材料の基礎研究	市川 貴之
2008/7/13-18	ポスター発表 Carbon 2008 (長野)	The Atmospheric Effect on the Nano-Structuring of Graphite during Milling	T. Ichikawa W. Ishida S. Isobe H. Miyaoka Y. Kojima
2008/7/13-18	ポスター発表 Carbon 2008 (長野)	Iron Effect for Hydrogen Absorption and Desorption Properties of Ball-milled Graphite	H. Miyaoka T. Ichikawa S. Isobe Y. Kojima
2008/8/6-8	口頭発表 第11回XAFS討論会 (姫路市、高輝度光科学研究センター)	XAFS法を用いた水素貯蔵材料開発1	木村 通 日野 聡 坪田 雅己 市川 貴之 小島 由継
2008/8/6-8	口頭発表 第11回XAFS討論会 (姫路市、高輝度光科学研究センター)	XAFS法を用いた水素貯蔵材料開発2	磯部 繁人 坪田 雅己 日野 聡 市川 貴之 小島 由継

2008/8/7-8	口頭発表 第48回日本金属学会中四国 支部大会 (高知工科大学)	室温でのアンモニア分解にお けるペロブスカイト型酸化物 の触媒効果	P. Biswajit 宮岡 裕樹 坪田 雅己 市川 貴之 小島 由継
2008/8/7-8	口頭発表 第48回日本金属学会中四国 支部大会 (高知工科大学)	アンモニアを媒介とした新規 水素貯蔵システムの研究	山本 ひかる 日野 聡 丹下 恭一 大松 千絵 宮岡 裕樹 坪田 雅己 市川 貴之 小島 由継
2008/8/7-8	口頭発表 第48回日本金属学会中四国 支部大会 (高知工科大学)	ボールミリングを用いた金属- 炭素化合物の作製および水素 吸蔵/放出特性評価	久保 田光 宮岡 裕樹 坪田 雅己 市川 貴之 小島 由継
2008/9/9-1	口頭発表 Third LANL-NEDO-AIST Workshop on Fuel Cell Performance Improvement & Hydrogen Storage (San Diego)	Hydrogen generation and storage using hydride and ammonia	Y. Kojima
2008/9/9-11	口頭発表 The Third LANL-NEDO-AIST Workshop on Fuel Cell Performance Improvement & Hydrogen Storage (San Diego)	Reaction Process of Nano-Carbon and LiH Composites	T. Ichikawa
2008/9/18-19	口頭発表 SPRING-8産業利用報告会 (日本科学未来館)	XAFS 法による水素貯蔵材料 で作用する触媒の状態分析	市川 貴之
2008/9/20-23	口頭発表 日本物理学会2008秋季大会 (岩手)	中性子及び放射光X線回折に よる軽元素水素貯蔵物質 ${}^7\text{Li}_2\text{ND}$ の構造解析	坪田 雅己 M. Sorby 日野 聡

			市川 貴之 B. Hauback 小島 由継
2008/9/20-23	口頭発表 日本物理学会2008秋季大会 (岩手)	水素貯蔵物質LiNH ₂ のラマン 散乱	道越 明孝 長谷川 巧 荻田 典男 磯部 繁人 坪田 雅己 市川 貴之 小島 由継 宇田川 眞行
2008/9/23-25	口頭発表 日本金属学会2008秋期大会 (熊本大学)	Catalytic Effect of ATiO ₃ (A=Sr, Ba, Ca) in Ammonia Decomposition	P. Biswajit 坪田 雅己 市川 貴之 小島 由継
2008/9/23-25	口頭発表 日本金属学会2008秋期大会 (熊本大学)	Gas Desorption Properties of Ammonia Borane and Metal Hydrides Composites	Matin Md. Ruhul 市川 貴之 磯部 繁人 日野 聡 呉成 明 宮岡 裕樹 坪田 雅己 小島 由継
2008/9/23-25	口頭発表 日本金属学会2008秋期大会 (熊本大学)	Mg-C-H系複合物質の水素吸 蔵/放出特性	宮岡 裕樹 市川 貴之 坪田 雅己 小島 由継
2008/9/23-25	口頭発表 日本金属学会2008秋期大会 (熊本大学)	ScH ₂ -MB _n 混合物(M=Mg, Ca) の高水素圧ミリングによる水 素化特性	中川 鉄水 市川 貴之 坪田 雅己 小島 由継
2008/9/23-25	口頭発表 日本金属学会2008秋期大会 (熊本大学)	Metal-Al-Amide系物質の熱分 解に伴うガス放出特性及び構 造変化	小野 泰輔 中川 鉄水 坪田 雅己 市川 貴之 小島 由継

2008/9/23-25	口頭発表 日本金属学会2008秋期大会 (熊本大学)	ミリング処理したアルカリ金属水素化物のX線を用いた分析	中村 耕生 市川 貴之 坪田 雅己 宮岡 裕樹 中川 鉄水 丹下 恭一 山本 ひかる 小島 由継
2008/9/23-25	口頭発表 日本金属学会2008年秋期大会 (熊本大学)	ミリング処理したアルカリ金属水素化物とアンモニアの反応性	山本 ひかる 日野 聡 丹下 恭一 大松 千絵 宮岡 裕樹 坪田 雅己 市川 貴之 小島 由継
2008/9/24-26	ポスター発表 触媒討論会 (名古屋大学)	水素吸蔵/放出反応過程におけるMgH ₂ に添加したNb酸化物のXAFS法によるキャラクターゼーション	木村 通 日野 聡 宮岡 裕樹 坪田 雅己 市川 貴之 小島 由継
2008/9/24-26	ポスター発表 触媒討論会 (名古屋大学)	Liアミド-イミド系水素貯蔵物質に添加したTi触媒のXAFS法による化学状態分析	市川 貴之 日野 聡 礒部 繁人 本間 徹生 坪田 雅己 小島 由継
2008/10/6	口頭発表 MH利用開発研究会平成20年度シンポジウム (大阪)	カリウムを用いた新規水素貯蔵システムの研究	山本 ひかる 日野 聡 丹下 恭一 宮岡 裕樹 坪田 雅己 市川 貴之 小島 由継
2008/10/6-10	口頭発表 International Energy	Basic research of nano-composite materials for	Y. Kojima

	Agency Hydrogen Implementing Agreement Expert Meeting of Hydrogen Storage - Task 22 (Roma), Italy	hydrogen storage	
2008/10/6	口頭発表 MH利用開発研究会平成20年度シンポジウム (大阪)	種々のナノ構造を持つグラファイトとマグネシウムの反応性	久保田 光 宮岡 裕樹 坪田 雅己 市川 貴之 小島 由継
2008/10/8	口頭発表 JST Innovation Bridge 広島大学研究発表会 (東京)	軽元素で構成され高容量水素貯蔵材料の研究	市川 貴之
2008/10/14	口頭発表 JAEA特別セミナー (JAEA/SPring-8)	軽元素系水素貯蔵物質に関する最近の研究	坪田 雅己
2008/10/21	口頭発表 もみじ・やまぐちビジネスマッチングフェア(広島)	水素機能性材料の研究開発	小島 由継
2008/11/3-5	口頭発表 The 11th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN11) The National Sun Yat-sen University in Kaohsiung (Taiwan)	Metal Ammine Halides for Hydrogen Storage	T. Tsumuraya T. Shishidou T. Oguchi
2008/11/3-6	口頭発表 Asia NANO 2008 (Singapore)	Hydrogen Storage System with Nano Hydride and Ammonia	Y. Kojima S. Hino H. Yamamoto K. Tange H. Miyaoka M. Tsubota T. Ichikawa S. Ohnuki
2008/11/3-6	ポスター発表 Asia NANO 2008	Factors Controlling Reactivity of Ammonia and	K. Tange H. Yamamoto

	(Singapore)	Metal Hydrides	H. Miyaoka S. Hino H. Fujii M. Tsubota T. Ichikawa Y. Kojima
2008/11/8-9	口頭発表 日韓セミナー (Korea)	Research activities of nano-composite materials for hydrogen storage	T. Ichikawa M. Tsubota Y. Kojima
2008/11/8-9	ポスター発表 日韓セミナー (Korea)	Gas desorption and structural properties of Li-Al-Amide system	T. Ono T. Nakagawa M. Tsubota T. Ichikawa Y. Kojima
2008/11/8-9	ポスター発表 日韓セミナー (Korea)	XPS study on lithiumhydride	K. Nakamura T. Ichikawa M. Tsubota H. Miyaoka T. Nakagawa K. Tange H. Yamamoto Y. Kojima
2008/11/8-9	ポスター発表 日韓セミナー (Korea)	Raman scattering of LiNH ₂	A. Michigoe T. Hasegawa N. Ogita M. Udagawa S. Isobe M. Tsubota T. Ichikawa Y. Kojima
2008/11/20-22	口頭発表 材料における水素有効利用 研究会 平成20年度研究会 (宮古島)	ホウ素系複合水素貯蔵物質の 作製と反応機構調査	小島 由継 中川 鉄水 坪田 雅己 市川 貴之
2008/11/20-22	口頭発表 材料における水素有効利用 研究会 平成20年度研究会	LiAl(NH ₂) ₄ のアンモニア放出 に伴う構造変化	宮岡 裕樹 小野 泰輔 坪田 雅己

	(宮古島)		市川 貴之 小島 健一 小島 由継
2008/11/29	口頭発表 第15回ヤングセラミスト・ミーティングin中四国 (広島大学)	水素エネルギー社会の構築を目指して～水素貯蔵技術の現状と展望～	小島 由継
2008/12/3-6	ポスター発表 第35回 炭素材料学会年会 (筑波大学)	リチウム-炭素-水素(Li-C-H)系複合物質の水素吸蔵/放出機構	宮岡 裕樹 市川 貴之 坪田 雅己 小島 由継
2008/12/3-6	ポスター発表 第35回 炭素材料学会年会 (筑波大学)	マグネシウム-炭素(Mg-C)化合物の合成及び水素吸蔵/放出特性	久保田 光 宮岡 裕樹 坪田 雅己 市川 貴之 小島 由継
2008/12/9	口頭発表 2008 International Conference and Exposition on Hydrogen and PEM Fuel Cell Technologies	Basic Research of Nano-Materials for Hydrogen Storage	Y. Kojima
2008/12/9-13	口頭発表 IUMRS-ICA 2008 (Nagoya)	Catalytic effect of ATiO ₃ (A= Sr, Ba) in Ammonia Decomposition at Ambient Temperature	P. Biswajit M. Tsubota T. Ichikawa Y. Kojima
2008/12/9-13	ポスター発表 IUMRS-ICA 2008 (Nagoya)	Gas Desorption Properties of Ammonia-Borane and Metal Hydride Composites as Hydrogen Storage Materials	Matin Md. Ruhul T. Ichikawa S. Isobe S. Hino C. Wu H. Miyaoka M. Tsubota Y. Kojima
2008/12/11-12	口頭発表 第28回水素エネルギー協会 (HESS)大会 (タワーホール)	アンモニア-金属水素化物反応による水素貯蔵システム	市川 貴之 山本 ひかる 丹下 恭一

	船堀、東京)		日野 聡 宮岡 裕樹 坪田 雅己 小島 由継
2008/12/11-12	口頭発表 第28回水素エネルギー協会 (HESS)大会 (タワーホール 船堀、東京)	Li-N-H系水素貯蔵物質に添加 されたTi系触媒のXAFS法に よる評価	磯部 繁人 坪田 雅己 日野 聡 本間 徹生 市川 貴之 小島 由継
2008/12/11-12	口頭発表 第28回水素エネルギー協会 (HESS)大会 (タワーホール 船堀、東京)	水素化グラファイト-水素化リ チウム複合物質の水素吸蔵/放 出反応機構	宮岡 裕樹 市川 貴之 坪田 雅己 小島 由継
2008/12/11-12	口頭発表 第28回水素エネルギー協会 (HESS)大会 (タワーホール 船堀、東京)	組成分析により評価したLiア ミド-イミド系水素貯蔵物質 の熱力学特性	日野 聡 市川 貴之 荻田 典男 宇田川 眞行 小島 由継
2008/12/11-12	口頭発表 第28回水素エネルギー協会 (HESS)大会 (タワーホール 船堀、東京)	CaH ₂ -CaB ₆ 混合物のミリング 処理による水素化特性	中川 鉄水 市川 貴之 坪田 雅己 小島 由継
2008/12/11-12	口頭発表 第28回水素エネルギー協会 (HESS)大会 (タワーホール 船堀、東京)	Metal-Al-Amide系物質の熱分 解に伴うガス放出特性及び構 造変化	小野 泰輔 中川 鉄水 坪田 雅己 市川 貴之 小島 健一 小島 由継
2008/12/11-12	口頭発表 第28回水素エネルギー協会 (HESS)大会 (タワーホール 船堀、東京)	アルカリ金属水素化物のX線 光電子分光分析	中村 耕生 坪田 雅己 仲武 昌史 日野 聡 市川 貴之 小島 由継
2008/12/11-12	ポスター発表 第28回水素エネルギー協会	触媒添加したマグネシウムの 水素化過程における律速段階	木村 通 市川 貴之

	(HESS)大会 (タワーホール船堀、東京)		小島 由継
2008/12/11-12	ポスター発表 第28回水素エネルギー協会 (HESS)大会 (タワーホール船堀、東京)	高純度MH ($M=Li, Na, K$)の合成	山本 ひかる 宮岡 裕樹 坪田 雅己 市川 貴之 小島 由継
2008/12/11-12	ポスター発表 第28回水素エネルギー協会 (HESS)大会 (タワーホール船堀、東京)	マグネシウム-炭素系複合物質の水素貯蔵特性	久保 田光 宮岡 裕樹 坪田 雅己 市川 貴之 小島 由継
2009/1/3-6	ポスター発表 International Conference on Hydrogen and Hydrogen Storage India, Methods and Materials (Bangalore)	Decomposition of ammonia by mechanical attrition of $ATiO_3$ (A= Sr, Ba)	P. Biswajit M. Tsubota T. Ichikawa Y. Kojima
2009/2/16	口頭発表 MH利用開発研究会 平成20年度第4回研究会(大阪府立大学大阪)	カリウムを用いた新規水素貯蔵システムの研究	山本 ひかる 日野 聡 丹下 恭一 宮岡 裕樹 坪田 雅己 市川 貴之 小島 由継
2009/2/18	口頭発表 第14回産学連携セミナー「エネルギー」(広島)	高密度水素貯蔵技術の現状と展望	小島 由継
2009/2/27	口頭発表 FC EXPO 2009 (東京)	高性能水素機能材料の研究開発	小島 由継
2009/3/13	口頭発表 FCH基盤技術懇談会 第44回定例懇談会 (大阪)	水素貯蔵技術の現状と未来	小島 由継
2009/3/10-11	ポスター発表 The 13 th Hiroshima International Symposium on Synchrotron Radiation	X-ray photoelectron spectroscopy for mechanically treated lithium hydride	K. Nakamura M. Tsubota M. Nakatake S. Hino

	(Hiroshima University)		T. Ichikawa Y. Kojima
2009/3/16-20	口頭発表 American Physical Society, March Meeting (Pittsburgh)	First-principles calculation for light element hydrogen -storage materials	T. Tsumuraya T. Shishidou T. Oguchi
2009/3/27-28	口頭発表 日本化学会第89春季年会 (2009) アドバンスト・テク ノロジー・プログラム(ATP) T7.新エネルギー技術 (日本 大学)	水素化物を用いた水素貯蔵の 新展開	小島 由継
2009/3/28-30	口頭発表 日本金属学会2009春期大会 (東京工業大学)	アンモニアを用いた水素貯蔵 システム(1)	宮岡 裕樹 藤井 博信 丹下 恭一 山本 ひかる 日野 聡 坪田 雅己 市川 貴之 小島 由継
2009/3/28-30	口頭発表 日本金属学会2009春期大会 (東京工業大学)	アンモニアを用いた水素貯蔵 システム(2)	山本 ひかる 日野 聡 宮岡 裕樹 坪田 雅己 市川 貴之 小島 由継
2009/3/28-30	口頭発表 日本金属学会2009春期大会 (東京工業大学)	第一原理分子動力学法による LiH 表面とアンモニアの相互 作用	山根 阿樹 下條 冬樹 星野 公三 市川 貴之 小島 由継
2009/3/28-30	口頭発表 日本金属学会2008春期大会 (東京工業大学)	LiAl(NH ₂) ₄ の熱分解に伴う ガス放出特性及び構造変化	小野 泰輔 中村 耕生 宮岡 裕樹 坪田 雅己 市川 貴之 小島 由継

2009/3/28-30	口頭発表 日本金属学会2008春期大会 (東京工業大学)	Thermal Diffusivity of Light Metal Amides [$M(\text{NH}_2)_x$; $M = \text{Li, Na, and Mg}$] by Heat Wave Propagation Method	P. Biswajit M. Tsubota T. Ichikawa Y. Kojima
2009/3/28-30	口頭発表 日本金属学会2008春期大会 (東京工業大学)	Mg-C 複合物質の水素貯蔵特 性評価	久保田 光 宮岡 裕樹 市川 貴之 小島 由継
2009/3/28-30	口頭発表 日本金属学会2008春期大会 (東京工業大学)	水素貯蔵物質 LiNH_2 単結晶 のラマン散乱による振動の帰 属と低温特性	道越 明孝 長谷川 功 荻田 典男 宇田川 眞行 磯部 繁人 坪田 雅己 市川 貴之 小島 由継
2009/3/28-30	口頭発表 日本金属学会2008春期大会 (東京工業大学)	アルミニウム水素化物 $M(\text{AlH}_4)_n$ の振動モードと電 子状態	圓谷 貴夫 獅子堂 達也 小口 多美夫
2009/3/28-30	口頭発表 日本金属学会2008春期大会 (東京工業大学)	Thermal Decomposition of Ammonia Borane and Calsium Hydride Composite	Md. R. Matin M. Tsubota T. Ichikawa Y. Kojima
2009/3/28-30	口頭発表 日本金属学会2008春期大会 (東京工業大学)	アルカリ金属水素化物の電荷 密度分布解析	坪田 雅己 山本 ひかる 中村 耕生 日野 聡 宮岡 裕樹 丹下 恭一 市川 貴之 小島 由継
2009/3/28-30	口頭発表 日本金属学会2008春期大会 (東京工業大学)	アンモニア PCT 測定による 金属アミドの熱力学特性評価 II	日野 聡 市川 貴之 小島 由継
2009/3/28-30	口頭発表 日本金属学会2008春期大会	核磁気共鳴法を用いた Sc- M B-H 系水素貯蔵物質(M	中川 鉄水 市川 貴之

	(東京工業大学)	=Mg, Ca)のキャラクタリゼーション	宮岡 裕樹 坪田 雅己 小島 健一 小島 由継
2009/3/28-30	ポスター発表 日本金属学会2008春期大会 (東京工業大学)	X線光電子分光によるLiHの表面分析方法の確立	中村 耕生 坪田 雅己 仲武 昌史 日野 聡 中川 鉄水 丹下 恭一 山本 ひかる 市川 貴之 小島 由継
2009/3/28-30	ポスター発表 日本金属学会2008春期大会 (東京工業大学)	触媒添加マグネシウムの水素吸蔵/放出過程における熱力学特性	木村 通 須賀 潔 市川 貴之 鈴木 讓 小島 由継

(非金属系G:北海道大学)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2008/4/2	口頭発表 International Symposium on Materials Design for Infrastructures	Observation of Hydrogen Strange Materials by Means of Environmental Cell TEM	S. Ohnuki K. Okudera K. Hamada T. Suda N. Hashimoto
2008/6/18	口頭発表 The workshop for early-stage researchers on The use of in-situ TEM/ion accelerator techniques in the study of radiation damage in solids, University of Salford	Application of In-Situ Electron Microscopy on Materials Science in Hokkaido University	S. Ohnuki
2008/11/2	口頭発表 9th Asia-Pacific Microscopy Conference, Jeju	Micro-lamellar Structure in Hydrogen Storage Mg-Ni Alloys	A. Ono H. Sitoh S. Ohnuki N. Hashimoto
2008/12/13	口頭発表 平成20年度日本顕微鏡学会北海道支部学術講演会, 札幌	環境セルによるLiHとNaHの分解過程のその場観察	大貫 惣明 平澤 寛子 濱田 弘一 橋本 直幸 須田 孝徳 小島 由継

2009/1/22	口頭発表 日本鉄鋼協会・日本金属学会両北海道支部合同冬季講演大会, 室蘭	その場TEM観察によるNaAlH ₄ 分解ナノ構造変化	川崎 洋 須田 孝徳 橋本 直幸 大貫 惣明
-----------	---	--	---------------------------------

(非金属系 G: 上智大学)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2008/6/24 -28	ポスター発表 MH 2008- International Symposium on Hydrogen-Metal Systems	Effect of mechanical stress on absorption and desorption of hydrogen of light materials at room temperature	Hiroshi Suzuki Nozomi Kirihara Hisashi Taniguchi Nobuko Hanada Kenichi Takai Yukito Hagihara
2008/9/19	口頭発表 日本金属学会2008年秋季大会	有機溶媒を用いたAlの電解水素チャージ	花田 信子 花輪 亮 鈴木 啓史 高井 健一
2009/3/28	口頭発表 日本金属学会2009年春季大会	有機溶媒中での電解水素チャージによる金属(Ti, Mg, Al)の水素化特性	花田 信子 花輪 亮 鈴木 啓史 高井 健一
2009/3/29	口頭発表 日本金属学会2009年春季大会	非水溶液中での電解水素チャージにおけるAl水素吸蔵特性の溶媒及び電解質依存性	鈴木 啓史 花輪 亮 花田 信子 高井 健一

(材料物性 G : 日本原子力研究開発機構)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2008/5/19	口頭発表 The 9th International Conference on “Protection of Materials and Structures from Space Environment”	Protection of diamond-like carbon films from an energetic atomic oxygen bombardment with Si-doping technology	M. Tagawa K. Yokota A. Kitamura K. Matsumoto A. Yoshigoe Y. Teraoka J. Fontaine M. Belin
2008/6/24	ポスター発表 International Symposium on	Instability of cubic-YH ₂ at high pressure	町田 晃彦 綿貫 徹 青木 勝敏

	Metal-Hydrogen Systems 2008 (MH2008)		
2008/6/24	ポスター発表 International Symposium on Metal-Hydrogen Systems 2008 (MH2008)	Raman and Visible Absorption Study of ScH ₃ at high pressure	久米 徹二 竹市 知生 佐々 木重雄 清水 宏晏 大村 彩子 町田 晃彦 綿貫 徹 青木 勝敏 竹村 謙一
2008/6/24	ポスター発表 International Symposium on Metal-Hydrogen Systems 2008 (MH2008)	Lattice Compression of Lithium Hydride up to 200 GPa	大石 泰生 平尾 直久 飯高 敏晃 町田 晃彦 青木 勝敏
2008/6/27	ポスター発表 International Symposium on Metal-Hydrogen Systems 2008 (MH2008)	Synthesis of AlH ₃ by hydrogenation of the metal at high pressure and temperature	齋藤 寛之 町田 晃彦 片山 芳則 青木 勝敏
2008/7/1	口頭発表 The 26th International Symposium on Space Technology and Science	Si-doping for the protection of hydrogenated diamond-like carbon films in a simulated atomic oxygen environment in LEO	K. Yokota M. Tagawa A. Kitamura K. Matsumoto A. Yoshigoe Y. Teraoka J. Fontaine M. Belin
2008/8/6	口頭発表 第 11 回 XAFS 討論会	La 金属水素化物の La L 吸収端 XAS 測定とその電子状態	石松 直樹 甲斐 広樹 笹田 良平 松下 昌輝

			圓山 裕 町田 晃彦 綿貫 徹 竹村 謙一 中野 智志 河村 直己 谷田 肇
2008/8/21	ポスター発表 第三回水素若手研究会	X線吸収スペクトルでみるLa金 属水素化物の電子状態	石松 直樹 甲斐 広樹 笹田 良平 松下 昌輝 圓山 裕 町田 晃彦 綿貫 徹 竹村 謙一 中野 智志 河村 直己 谷田 肇
2008/8/22	口頭発表 4th International Workshop on Reactions involving Oxidation and Hydrogen	Synchrotron radiation photoemission spectroscopy for native oxide, its thermal instability and re-oxidation of hydrogen storage metals	寺岡 有殿 ハリーズ・ジェー ムズ 吉越 章隆
2008/8/22	口頭発表 4th International Workshop on Reactions involving Oxidation and Hydrogen	SERDA/RBS/SR-PES study on the effect of reactive atomic beam exposures to hydrogenated diamond-like carbon films relevance to hydrogen storage	M. Tagawa K. Yokota A. Kitamura A. Yoshigoe Y. Teraoka
2008/9/2	口頭発表 第69回応用物理学会学 術講演会	原子状酸素を照射した水素化ダイ ヤモンドライクカーボン薄膜の水 素分布	田川 雅人 横田 久美子 北村 晃 松本 康司 吉越 章隆 寺岡 有殿
2008/9/10	口頭発表 LANL-NEDO-AIST Workshop (Hydrogen	High-Pressure Studies of Metal Hydrides using Synchrotron Radiation X-rays at SPring-8	町田 晃彦

	Storage & Fuel Cell Workshop)		
2008/9/15	ポスター発表 2008 European Materials Society (E-MRS) Fall Meeting	New oxide formed by oxygen molecular beam on vanadium and its alloys as observed by photoemission spectroscopy with synchrotron radiation	寺岡 有殿 吉越 章隆 ハリーズ・ジェームズ
2008/9/21	口頭発表 日本物理学会 2008 年秋季大会	液体鉄水素化物の構造	片山 芳則 蓬田 美樹 齋藤 寛之 青木 勝敏
2008/9/23	口頭発表 日本物理学会 2008 年秋季大会	La L および K 吸収端 X 線吸収スペクトルでみる La 金属水素化物の電子状態	石松 直樹 甲斐 広樹 笹田 良平 松下 昌輝 圓山 裕 町田 晃彦 綿貫 徹 竹村 謙一 中野 智志 河村 直己 谷田 肇
2008/9/23	口頭発表 日本物理学会 2008 年秋季大会	Sc 水素化物の高圧ラマン散乱および可視吸収スペクトル	久米 徹二 竹市 知生 佐々木 重雄 清水 宏晏 町田 晃彦 綿貫 徹 青木 勝敏 大村 彩子 竹村 謙一
2008/10/14	口頭発表 The 4th Asian Conference on High Pressure Research	High pressure for producing dense metal hydride and synchrotron radiation X-rays for proving hydrogen-metal bonding	青木 勝敏 町田 晃彦
2008/10/28	ポスター発表 4th Vacuum and	Selective etching of sp ² carbon in a diamond-like carbon film by	M. Tagawa K. Yokota

	Surface Sciences Conference of Asia and Australia (VASSCAA-4)	hyperthermal atomic oxygen exposures	A. Kitamura K. Matsumoto A. Yoshigoe Y. Teraoka K. Kanda M. Niibe
2008/10/28	ポスター発表 4th Vacuum and Surface Sciences Conference of Asia and Australia (VASSCAA-4)	Change in hydrogen amount in a diamond-like carbon film under hyperthermal atomic oxygen exposure	K. Yokota M. Tagawa A. Kitamura K. Matsumoto A. Yoshigoe Y. Teraoka
2008/10/29	ポスター発表 4th Vacuum and Surface Sciences Conference of Asia and Australia (VASSCAA-4)	Photoemission study on oxide at poly-vanadium surface	寺岡 有殿 吉越 章隆 ハリーズ・ジェームズ
2008/11/11	ポスター発表 The 5th International Symposium on Surface Science and Nanotechnology (ISSS-5)	Photoemission analyses on oxides at single crystal Vanadium surfaces	寺岡 有殿 吉越 章隆 ハリーズ・ジェームズ
2008/10/30 -11/1	ポスター発表 第12回 SPring-8 シンポジウム	SPring-8における核共鳴散乱研究 の現状	三井 隆也 瀬戸 誠
2008/11/12	ポスター発表 第49回高圧討論会	LaHx(x~1.9)の圧力下電気抵抗測定- 圧力誘起相分離に伴う電气的 特性の変化	松岡 岳洋 町田 晃彦 清水 克哉 青木 勝敏
2008/11/12	口頭発表 第49回高圧討論会	マルチメガバール領域における放 射光メスバウア分光法	平尾 直久 三井 隆也 瀬戸 誠 大石 泰生
2008/11/13	口頭発表 第49回高圧討論会	希土類金属 2 水素化物の圧力誘起 不均化反応	町田 晃彦 綿貫 徹 川名 大地

			青木 勝敏
2008/11/13	口頭発表 第 49 回高圧討論会	赤外反射分光による LaH ₂ の圧力 誘起不均化反応の観測	櫻井 陽子 町田 晃彦 青木 勝敏
2008/11/13	ポスター発表 高圧討論会	高温高圧下での金属アルミニウム の水素化による AlH ₃ 合成	齋藤 寛之 町田 晃彦 片山 芳則 青木 勝敏
2008/11/14	口頭発表 第 49 回高圧討論会	J-PARC 高強度全散乱装置 (NOVA) での高圧実験にむけて	服部 高典 片山 芳則 町田 晃彦 大友 季哉 鈴谷 賢太郎
2008/11/14	口頭発表 第 49 回高圧討論会	鉄水素化物液体の構造	片山 芳則 蓬田 美樹 齋藤 寛之 青木 勝敏
2008/11/22	口頭発表 第 7 回水素量子アトムク ス研究会	X 線回折、赤外反射スペクトル測 定による希土類金属 2 水素化物の 圧力誘起不均化反応	町田 晃彦 櫻井 陽子 青木 勝敏
2008/11/22	口頭発表 第 7 回水素量子アトムク ス研究会	放射光メスバウワー測定による FeH の圧力誘起強磁性-常磁性転 移	平尾 直久 大石 泰生 三井 隆也 瀬戸 誠 竹村 謙一 亀卦川 卓美
2008/12/2	ポスター発表 中性子科学会第 8 回年会	固体中水素の微視的挙動の解明 ー粉末中性子回折実験ー	深澤 裕
2009/1/7	ポスター発表 SPring-8 利用者懇談会 地球惑星科学研究会・高 圧物質科学研究会 2008 年度合同研究会合	高圧下における希土類金属水素化 物の不均化反応	町田 晃彦 綿貫 徹 川名 大地 青木 勝敏
2009/2/24	口頭発表 水素貯蔵材料フォーラ ム 2009	放射光利用による水素と材料の相 互作用の研究展開	町田 晃彦

2009/3/18	ポスター発表 The International Workshop for Surface Analysis and Standardization 2009 (iSAS'09)	Synchrotron Radiation Photoemission Spectroscopy for Native Oxide Layer on Vanadium and VCrTa	寺岡 有殿 吉越 章隆 ハリーズ・ジェームズ
2009/3/28	口頭発表 日本物理学会 第64回 年次大会	放射光による neV 分光法の開発 (V)GdFe ₂ の超高压下放射光メスバウアー分光	三井 隆也 増田 亮 瀬戸 誠 平尾 直久
2009/3/28	口頭発表 日本物理学会 第64回 年次大会	149Sm 放射光核共鳴散乱による希土類鉄系水素化物の研究	増田 亮 三井 隆也 伊藤 恵司 小林 康浩 北尾 真司 瀬戸 誠
2009/3/29	口頭発表 日本物理学会 第64回 年次大会	希土類金属水素化物における圧力誘起相分離	町田 晃彦 綿貫 徹 川名 大地 青木 勝敏
2009/3/29	口頭発表 日本物理学会 第64回 年次大会	振動分光法による LaH ₂ の圧力誘起不均化反応の観測	櫻井 陽子 町田 晃彦 青木 勝敏
2009/3/30	口頭発表 日本物理学会 第64回 年次大会	液体鉄水素化物の構造 II	片山 芳則 蓬田 美樹 齋藤 寛之 青木 勝敏

(材料物性 G : 兵庫県立大学)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2008/5/26	ポスター発表 2nd International Conference on New Diamond and Nano Carbons (NDNC2008)	Graphitization of thin films formed by focused-ion-beam chemical-vapor-deposition	神田 一浩 山田 倫子 岡田 真 井垣 潤也 米谷 玲皇 松井 真二
2008/9/2	ポスター発表	FIB-CVD 法で形成された DLC	神田 一浩

	第 69 回応用物理学会学術講演会	薄膜のアニールによる局所構造変化	岡田 真 山田 倫子 井垣 潤也 米谷 玲皇 松井 真二
2008/9/22	ポスター発表 日本物理学会 2008 年秋季大会	水素含有ダイヤモンドライクカーボン薄膜の電子状態	春山 雄一 田川 雅人 横田 久美子 松井 真二
2008/10/28	ポスター発表 4th Vacuum and Surface Sciences Conference of Asia and Australia	Selective etching of sp ² carbon in a diamond-like carbon film by hyperthermal atomic oxygen exposures	M. Tagawa K. Yokota A. Kitamura K. Matsumoto A. Yoshigoe Y. Teraoka K. Kanda M. Niibe
2008/11/18	ポスター発表 第 22 回ダイヤモンドシンポジウム	水素化DLC膜の軟X線照射による改質効果	神田 一浩 新部 正人 田川 雅人 横田 久美子 松井 真二
2008/12/10	口頭発表 The IUMRS International Conference in Asia 2008 (IUMRS-ICA 2008)	Variation on Local Structure of DLC Thin Films Formed with FIB-CVD Method by Annealing	神田 一浩 岡田 真 松井 真二
2009/1/12	ポスター発表 第 22 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム	水素含有ダイヤモンドライクカーボン薄膜の光電子分光	春山 雄一 田川 雅人 横田 久美子 松井 真二
2009/3/30	口頭発表 第 56 回応用物理学関係連合講演会	軟X線照射による水素化DLC膜の改質	神田 一浩 赤坂 大樹 斎藤 秀俊 松井 真二

(材料物性 G : 神戸大学)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2008/5/19	口頭発表 9th International Space Conference, Protection of Materials and Structures from the LEO Space Environment	Protection of diamond-like carbon films from an energetic atomic oxygen bombardment with Si-doping technology	Kumiko Yokota Masahito Tagawa Akira Kitamura Koji Matsumoto Akitaka Yoshigoe Yuden Teraoka Julien Fontaine Michel Belin
2008/7/1	口頭発表 26th International Symposium on Space Technology and Sciences	Si-doping for the protection of hydrogenated diamond-like carbon films in a simulated atomic oxygen environment in LEO	Kumiko Yokota Masahito Tagawa Akira Kitamura Koji Matsumoto Akitaka Yoshigoe Yuden Teraoka Julien Fontaine Michel Belin
2008/8/22	口頭発表 4th International Workshop on Reactions involving Oxidation & Hydrogen	ERDA/RBS/SR-PES study on the effect of reactive atomic beam exposures to the hydrogenated diamond-like carbon films	Masahito Tagawa Kumiko Yokota Akira Kitamura Akitaka Yoshigoe Yuden Teraoka
2008/9/2	口頭発表 第 69 回応用物理学会学術講演会	原子状酸素を照射した水素化ダイヤモンドライクカーボン薄膜の水素分布	田川 雅人 横田 久美子 北村 晃 松本 康司 吉越 章隆 寺岡 有殿
2008/9/22	ポスター発表 日本物理学会 2008 秋季大会	水素含有ダイヤモンドライクカーボン薄膜の電子状態	春山 雄一 田川 雅人 横田 久美子 松井 真二
2008/10/21	ポスター発表 第 22 回ダイヤモンドシンポジウム	水素化 DLC 膜の軟 X 線照射による改質効果	神田 一浩 新部 正人 田川 雅人 横田 久美子

			松井 真二
2008/10/28	ポスター発表 4th Vacuum and Surface Sciences Conference of Asia and Australia	Selective etching of sp ² carbon in a diamond-like carbon film by hyperthermal atomic oxygen exposures	Masahito Tagawa Kumiko Yokota Akira Kitamura Koji Matsumoto Akitaka Yoshigoe Yuden Teraoka Kazuhiro Kanda Masahito Niibe
2008/10/28	ポスター発表 4th Vacuum and Surface Sciences Conference of Asia and Australia	Change in hydrogen amount in a diamond-like carbon film under hyperthermal atomic oxygen exposures	Kumiko Yokota, Masahito Tagawa Akira Kitamura Koji Matsumoto Akitaka Yoshigoe Yuden Teraoka
2009/1/12	ポスター発表 第 22 回日本放射光学会 年会放射光科学合同シ ンポジウム	水素含有ダイヤモンドライク カーボン薄膜の光電子分光	春山 雄一 田川 雅人 横田 久美子 松井 真二

(材料物性 G : 大阪大学)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2008/8/22	口頭発表 4th International Workshop on Reactions involving Oxidation and Hydrogen	Temperature dependence of Cu-oxide formation with hyperthermal oxygen molecular beam	M. Okada A. Yoshigoe Y. Teraoka T. Kasai
2008/10/14	口頭発表 The 12th International Symposium of Stereodynamics of Chemical Reactions	Stereodynamics of chemical reactions in heterogeneous systems: Dissociative adsorption of NO on Si(111)	M. Hashinokuchi M. Okada H. Ito T. Kasai K. Moritani Y. Teraoka
2008/11/11	口頭発表 the International Workshop on Molecular Information and	Chemical reactions dynamics: From atomic level to global view	M. Okada H. Ito K. Moritani Y. Teraoka

	Dynamics 2008		
2008/11/12	ポスター発表 第 49 回高圧討論会	LaHx(x~1.9)の圧力下電気抵抗測定-圧力誘起相分離に伴う電気的特性の変化	松岡 岳洋 町田 晃彦 清水 克哉 青木 勝敏
2008/11/13	ポスター発表 第 49 回高圧討論会	Liquid hydrogen loading system for DAC	Roman Morgunov 松岡 岳洋 加賀 山朋子 清水 克哉

(材料物性 G:高輝度光科学研究センター)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2008/6/27	ポスター発表 International Symposium on Metal-Hydrogen Systems (MH2008)	Formation of platinum hydride at high pressure	N. Hirao H. Fujihisa Y. Ohishi K. Takemura T. Kikegawa
2008/6/27	ポスター発表 International Symposium on Metal-Hydrogen Systems (MH2008)	Lattice Compression of Lithium Hydride up to 200 GPa	Y. Ohishi N. Hirao T. Iitaka A. Machida K. Aoki
2008/8/26-27	ポスター発表 XXI Congress of the International Union of Crystallography (IUCr)	Synthesis and structure of new platinum hydrides at high pressure	N. Hirao H. Fujihisa Y. Ohishi K. Takemura T. Kikegawa
2008/11/12	口頭発表 第 49 回高圧討論会	マルチメガバール領域における放射光メスバウア分光法	平尾 直久 三井 隆也 瀬戸 誠 大石 泰生
2008/11/13	ポスター発表 第 49 回高圧討論会	高圧力下における白金水素化物の発見	平尾 直久 藤久 裕司 大石 泰生 竹村 謙一 亀卦川 卓美
2008/11/22	口頭発表	放射光メスbauer測定による	平尾 直久

	第7回水素量子アトムクス研究会	FeH の圧力誘起強磁性-常磁性転移	大石 泰生 三井 隆也 瀬戸 誠 竹村 謙一 亀卦川 卓美
--	-----------------	--------------------	---

(材料物性 G:広島大学理学研究科)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2008/8/6	口頭発表 第11回 XAFS 討論会	La 金属水素化物の La L 吸収端 XAS 測定とその電子状態	石松 直樹 甲斐 広樹 笹田 良平 松下 昌輝 圓山 裕 町田 晃彦 綿貫 徹 竹村 謙一 中野 智志 河村 直己 谷田 肇
2008/8/21	ポスター発表 第三回水素若手研究会	X線吸収スペクトルでみる La 金属水素化物の電子状態	石松 直樹 甲斐 広樹 笹田 良平 松下 昌輝 圓山 裕 町田 晃彦 綿貫 徹 竹村 謙一 中野 智志 河村 直己 谷田 肇
2008/9/23	口頭発表 日本物理学会 2008 秋季大会	La L および K 吸収端 X線吸収スペクトルでみる La 金属水素化物の電子状態	石松 直樹 甲斐 広樹 笹田 良平 松下 昌輝 圓山 裕 町田 晃彦 綿貫 徹

			竹村 謙一 中野 智志 河村 直己 谷田 肇
--	--	--	---------------------------------

(材料物性 G:岐阜大学)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2008/6/25	ポスター発表 International Symposium on Metal-Hydrogen Systems (MH2008)	Raman and Visible Absorption Study of ScH ₃ at high pressure	久米 徹二 佐々木 重雄 清水 宏晏 町田 晃彦 綿貫 徹 青木 勝敏 大村 彩子 竹村 謙一
2008/9/23	口頭発表 日本物理学会 2008 年秋 季大会	Sc 水素化物の高圧ラマン散乱およ び可視吸収スペクトル	久米 徹二 竹市 知生 佐々木 重雄 清水 宏晏 町田 晃彦 綿貫 徹 青木 勝敏 大村 彩子 竹村 謙一
2008/11/22	口頭発表 第 7 回水素量子アトミク ス研究会	Sc 水素化物の高圧ラマン散乱およ び可視吸収スペクトル	久米 徹二 佐々木 重雄 清水 宏晏

(材料物性 G:東北大学 大学院工学研究科)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2008/9/4	口頭発表 第 69 回応用物理学会学術 講演会	水素貯蔵材料の分光学的解析と新 機能性	高村 仁 前川 英己 橋本 真一 松尾 元彰 折茂 慎一
2008/11/12-14	ポスター発表	水素貯蔵材料評価用高温・雰囲気	橋本 真一

	第 47 回 NMR 討論会	制御 NMR システムの開発	野田 泰斗 前川 英己 高村 仁 藤戸 輝昭 池田 武義
2009/3/10	口頭発表 ECI:Nonstoichio- metric Compounds	Defect Structure and Transport Properties of Mg-Y-Based Hydrides Prepared under High Pressure	H. Takamura K. Kurosu H. Maekawa
2009/3/30	口頭発表 日本金属学会 2009 年春期 大会	水素貯蔵材料評価のための温度・ 雰囲気制御 NMR システムの開 発	橋本 真一 野田 泰斗 前川 英己 高村 仁 藤戸 輝昭 池田 武義

(計算科学 G:産業技術総合研究所 計算科学研究部門)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2008/4/22	口頭発表 OpenMX/QMAS Workshop (石川)	Potential surface of hydrogen atom in LaNi ₅ H	A. Tezuka H. Wang H. Ogawa T. Ikeshoji
2008/5/7	口頭発表 第 6 回ナノ学会 (福岡)	水素誘起アモルファス化における 構造安定性の動力的効果	片桐 昌彦 小川 浩
2008/5/8	口頭発表 第 6 回ナノ学会 (福岡)	モデル原子間ポテンシャルによる 水素貯蔵シミュレーション	小川 浩 片桐 昌彦
2008/5/8	口頭発表 第 6 回ナノ学会 (福岡)	水素貯蔵材のナノスケールシミュ レーション -拡散経路の検討-	池庄司 民夫 手塚 明則 王 昊 小川 浩
2008/5/28	口頭発表 第 13 回分子動力学シンポ ジウム (鹿児島)	LaNi ₅ の水素吸蔵サイト間のポ テンシャル解析	手塚 明則 王 昊 小川 浩 池庄司 民夫
2008/6/4	口頭発表 Clean Technology 2008 (Boston)	Computer Simulation of Hydrogen Storage Materials	M. Katagiri H. Onodera H. Ogawa

2008/6/4	口頭発表 NSTI Nanotech 2008 (Boston)	Structural Stability of Hydrogen Storage Materials	M. Katagiri H. Onodera H. Ogawa
2008/6/25	口頭発表 MH2008 - International Symposium on Metal-Hydrogen (Reykjavik)	First principles calculation of potential surface of hydrogen atom in LaNi ₅ H	A. Tezuka H. Wang H. Ogawa T. Ikeshoji
2008/6/25	口頭発表 MH2008 - International Symposium on Metal-Hydrogen (Reykjavik)	Simulation on Diffusion of Hydrogen Atoms in NaAlH ₄	H. Wang A. Tezuka H. Ogawa T. Ikeshoji
2008/6/25	口頭発表 MH2008 - International Symposium on Metal-Hydrogen (Reykjavik)	Parameter Physics on the Hydrogen Diffusion into Metallic Nanoparticles by MD Simulation	H. Ogawa A. Tezuka H. Wang T. Ikeshoji
2008/6/25	口頭発表 MH2008 - International Symposium on Metal-Hydrogen (Reykjavik)	Hydrogen-Induced Electronic and Structure Changes in Vanadium	Y. Tanaka M. Katagiri H. Onodera H. Ogawa
2008/6/25	口頭発表 MH2008 - International Symposium on Metal-Hydrogen (Reykjavik)	Computer Simulation of Structural Stability of Hydrogen-Storage Materials	M. Katagiri H. Onodera H. Ogawa
2008/9/10	口頭発表 The 3rd LANL-NEDO-AIST Workshop on Fuel Cell Performance Improvement & Hydrogen Storage	Simulation Studies on Hydrogen Storage Processes in the Hydro-star Project	H. Ogawa

	Materials (San Diego)		
2008/9/17	口頭発表 2nd EuCheMS Chemistry Congress (Torino)	Pressure-Concentration-Temperature Curves of Hydrogen Storage Materials by Computer Simulation	T. Vasileios M. Katagiri H. Onodera H. Ogawa
2008/9/25	口頭発表 日本金属学会 2008 年秋期 大会 (熊本)	水素貯蔵による水素貯蔵材料の電子・結晶構造変化	田中 喜典 片桐 昌彦 小野寺 秀博 小川 浩
2008/9/25	口頭発表 日本金属学会 2008 年秋期 大会 (熊本)	LaNi ₅ の水素吸蔵サイト間移動の第一原理解析	手塚 明則 王 昊 小川 浩 池庄司 民夫
2008/9/25	口頭発表 日本金属学会 2008 年秋期 大会 (熊本)	Simulation on Diffusion of Hydrogen Atoms in NaAlH ₄	王 昊 手塚 明則 小川 浩 池庄司 民夫
2008/10/27	口頭発表 Fourth International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2008), Tallahassee, FL, USA	Structural Stability of Hydrogen Storage materials	M. Katagiri H. Onodera H. Ogawa
2008/11/6	口頭発表 The 2008 Asian Conference on Nanoscience and Nanotechnology (AsiaNANO 2008) (Singapore)	Molecular dynamics study of structural stability of hydrogen storage materials	M. Katagiri H. Onodera H. Ogawa
2008/11/6	口頭発表 The 2008 Asian Conference on Nanoscience and Nanotechnology (AsiaNANO 2008) (Singapore)	Electronic and Crystal Structural Changes in BCC Type Hydrogen Storage Materials	Y. Tanaka M. Katagiri H. Onodera H. Ogawa

2008/11/6	口頭発表 The 2008 Asian Conference on Nanoscience and Nanotechnology (AsiaNANO 2008) (Singapore)	Reconstruction of pressure-concentration-temperat ure curves of RNi ₅ (R=La, Pr, Nd, and Sm) hydrogen storage materials by computer simulation	T. Vasileios M. Katagiri H. Onodera H. Ogawa
2008/11/6	口頭発表 The 2008 Asian Conference on Nanoscience and Nanotechnology (AsiaNANO 2008) (Singapore)	First principles analysis on hydrogen hopping in LaNi ₅	A. Tezuka H. Wang H. Ogawa T. Ikeshoji
2008/11/6	口頭発表 The 2008 Asian Conference on Nanoscience and Nanotechnology (AsiaNANO 2008) (Singapore)	Parameter Physics on the Hydrogen Diffusion into Metallic Nanoparticles by MD Simulation	H. Ogawa A. Tezuka H. Wang T. Ikeshoji M. Katagiri
2008/11/6	口頭発表 The 2008 Asian Conference on Nanoscience and Nanotechnology (AsiaNANO 2008) (Singapore)	First principles study on hydrogen atom hopping in NaAlH ₄	H. Wang A. Tezuka H. Ogawa T. Ikeshoji
2008/11/19	口頭発表 第 22 回分子シミュレーシ ョン討論会 (岡山)	古典分子動力学法を用いた水素貯 蔵材料の特性発現に関するパラメ ータ・フィジックス	小川 浩 手塚 明則 王 昊 池庄司 民夫 片桐 昌彦
2008/12/2	口頭発表 2008 MRS Fall Meeting (Boston)	Structural Stability by Hydrogenation in Hydrogen Storage Materials	M. Katagiri H. Onodera H. Ogawa

2008/12/9	口頭発表 IUMRS International Conference in Asia 2008 (Nagoya)	Structural Stability by Hydrogenation in Hydrogen Storage Materials	M. Katagiri H. Onodera H. Ogawa
2008/12/9	口頭発表 IUMRS International Conference in Asia 2008 (Nagoya)	Ab-initio study of electronic and crystal structure of metal hydrides (BCC-type)	Y. Tanaka M. Katagiri H. Onodera H. Ogawa
2008/12/9	口頭発表 IUMRS International Conference in Asia 2008 (Nagoya)	Pressure-Concentration-Temperat ure Curves of RNi ₅ (R= La, Pr, Nd and Sm) Hydrogen Storage Materials by Computer Simulation	T. Vasileios, M. Katagiri H. Onodera H. Ogawa
2008/12/9	口頭発表 Computational Science Workshop 2008 (CSW2008) (Tsukuba)	First principles analysis on hydrogen hopping in LaNi ₅	A. Tezuka H. Wang H. Ogawa T. Ikeshoji
2008/12/9	口頭発表 Computational Science Workshop 2008 (CSW2008) (Tsukuba)	First Principles study on Hydrogen atom hopping in NaAlH ₄ with one vacancy	H. Wang A. Tezuka H. Ogawa T. Ikeshoji
2009/2/17	口頭発表 The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization) (Sendai)	First principles analysis on hydrogen hopping in hydrogen storage materials	A. Tezuka H. Wang H. Ogawa T. Ikeshoji
2009/2/18	口頭発表 The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization) (Sendai)	Doping Effect on Enthalpy in V-H system	Y. Tanaka M. Katagiri H. Onodera H. Ogawa
2009/3/26	Seminar on Hydrogen Storage Materials (つく	Computer simulation studies on hydrogen storage materials in	H. Ogawa

	ば)	the Hydro-Star project	
2009/3/29	口頭発表 日本金属学会 2009 年春期 大会 (東京)	古典分子動力学法を用いた bcc, fcc 金属格子中の水素原子の動的 挙動の解析	小川 浩 手塚 明則 王 昊 池庄司 民夫 片桐 昌彦
2009/3/29	口頭発表 日本金属学会 2009 年春期 大会 (東京)	LaNi ₅ の水素移動における原子 緩和効果の第一原理解析	手塚 明則 王 昊 池庄司 民夫 小川 浩
2009/3/29	口頭発表 日本金属学会 2009 年春期 大会 (東京)	First Principles study on Hydrogen atom hopping in NaAlH ₄	王 昊 手塚 明則 小川 浩 池庄司 民夫
2009/3/29	口頭発表 日本金属学会 2009 年春期 大会 (東京)	A Model for Calculating P-C-T Curves of Hydrogen Storage Materials	T. Vasileios M. Katagiri H. Onodera H. Ogawa
2009/3/30	口頭発表 日本金属学会 2009 年春期 大会 (東京)	Cr 添加による V 基水素貯蔵合金 の特性変化と電子構造	田中 喜典 片桐 昌彦 小野寺 秀博 小川 浩

(計算科学 G:物質・材料研究機構)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2008/5/7	口頭発表 ナノ学会第 6 回大会、九州大 学医学部百年講堂	水素誘起アモルファス化におけ る構造安定性の動力的効果	片桐 昌彦 小野寺 秀博 小川 浩
2008/5/7	口頭発表 ナノ学会第 6 回大会、九州大 学医学部百年講堂	モデル原子間ポテンシャルによ る水素貯蔵シミュレーション	小川 浩 片桐 昌彦
2008/6/1	ポスター発表 Cleantech 2008, Boston, USA	Structural Stability of Hydrogen Storage Materials	M.Katagiri H.Onodera H.Ogawa
2008/6/1	ポスター発表 Cleantech 2008, Boston, USA	Computer Simulation of Hydrogen Storage Materials	M.Katagiri H.Onodera H.Ogawa

2008/6/24	ポスター発表 2008 International Symposium on Metal-Hydrogen Systems (MH2008) , Reykjavik, Iceland	Parameter Physics on the Hydrogen Diffusion into Metallic Nanoparticles by MD Simulation	H.Ogawa A.Tezuka H. Wang T,Ikeshoji M.Katagiri
2008/6/24	ポスター発表 2008 International Symposium on Metal-Hydrogen Systems (MH2008) , Reykjavik, Iceland	Hydrogen-Induced Electronic and Structure Changes in Vanadium	Y.Tanaka M.Katagiri H.Onodera H.Ogawa
2008/6/24	ポスター発表 2008 International Symposium on Metal-Hydrogen Systems (MH2008) , Reykjavik, Iceland	Computer Simulation of Structural Stability of Hydrogen-Storage Materials	M.Katagiri H.Onodera H.Ogawa
2008/9/16	ポスター発表 2nd EuCheMS Chemistry Congress, Torino, Italy	Role of Elastic Instability in Hydrogen Induced Amorphization	M.Katagiri H.Onodera H.Ogawa
2008/9/16	ポスター発表 2nd EuCheMS Chemistry Congress, Torino, Italy	Pressure-Concentration-Tempe rature Curves of Hydrogen Storage Materials by Computer Simulation	V.Tserolas M.Katagiri H.Onodera H.Ogawa
2008/9/23	口頭発表 日本金属学会 2008 年度秋期 大会、 熊本	水素貯蔵による水素貯蔵材料の 電子・結晶構造変化	田中 喜典 片桐 昌彦 小野寺 秀博 小川 浩
2008/10/27	ポスター発表 Fourth International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2008), Tallahassee, FL, USA	Structural Stability of Hydrogen Storage Materials	M.Katagiri H.Onodera H.Ogawa
2008/11/3	ポスター発表 The 2008 Asian Conference	Molecular Dynamics Study of Structural Stability o f	M.Katagiri H.Onodera

	on Nanoscience and Nanotechnology (AsiaNANO 2008), Singapore	Hydrogen Storage	H.Ogawa
2008/11/3	ポスター発表 The 2008 Asian Conference on Nanoscience and Nanotechnology (AsiaNANO 2008), Singapore	Electronic and Crystal Structural Changes in BCC Type Hydrogen Storage Materials	Y.Tanaka M.Katagiri H.Onodera H.Ogawa
2008/11/3	ポスター発表 The 2008 Asian Conference on Nanoscience and Nanotechnology (AsiaNANO 2008), Singapore	Reconstruction of Pressure-Concentration-Temperature Curves of RNi ₅ (R = La, Pr, Nd and Sm) Hydrogen Storage Materials by Computer Simulation	V.Tserolas M.Katagiri H.Onodera H.Ogawa
2008/11/3	ポスター発表 The 2008 Asian Conference on Nanoscience and Nanotechnology (AsiaNANO 2008), Singapore	Parameter Physics on the Hydrogen Diffusion into Metallic Nanoparticles by MD Simulation	H.Ogawa A.Tezuka H.Wang T.Ikeshoji M.Katagiri
2008/12/2	ポスター発表 2008 MRS Fall Meeting, Boston, USA	Structural Stability by Hydrogenation in Hydrogen Storage Materials	M.Katagiri H.Onodera H.Ogawa
2008/12/9	ポスター発表 IUMRS International Conference in Asia 2008 (IUMRS-ICA 2008), Nagoya, Japan	Structural Stability by Hydrogenation in Hydrogen Storage Materials	M.Katagiri H.Onodera H.Ogawa
2008/12/9	ポスター発表 IUMRS International Conference in Asia 2008 (IUMRS-ICA 2008), Nagoya, Japan	ab-initio study of electronic and crystal structure of metal hydrides (BCC-Type)	Y.Tanaka M.Katagiri H.Onodera H.Ogawa
2008/12/9	ポスター発表 IUMRS International Conference in Asia 2008 (IUMRS-ICA 2008), Nagoya, Japan	Pressure-Concentration-Temperature Curves of RNi ₅ (R= La, Pr, Nd and Sm) Hydrogen Storage Materials by Computer Simulation	V.Tserolas, M.Katagiri, H.Onodera H.Ogawa

2009/2/16	ポスター発表 The Third General Meeting of ACCMS-VO, Sendai, Japan	Doping Effect on Enthalpy in V-H system	Y.Tanaka M.Katagiri H.Onodera H.Ogawa
2009/3/28	口頭発表 日本金属学会 2009年春期 (第144回)講演大会、東 京工業大学大岡山キャンパス	古典分子動力学法を用いた bcc, fcc 金属格子中の水素原子の動的 挙動の解析	小川 浩 手塚 明則 王 昊 池庄司 民夫 片桐 昌彦
2009/3/28	口頭発表 日本金属学会 2009年春期 (第144回)講演大会、東 京工業大学大岡山キャンパス	A Model for Calculating P-C-T Curves of Hydrogen Storage Materials	V. Tserolas M. Katagiri H. Onodera H.Ogawa
2009/3/28	口頭発表 日本金属学会 2009年春期 (第144回)講演大会、東 京工業大学大岡山キャンパス	Cr 添加による V 基水素貯蔵合 金の特性変化と電子構造	田中 喜典 片桐 昌彦 小野 寺秀博 小川 浩

(計算科学 G:東北大学 金属材料研究所)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2008/5/8	ポスター発表 ナノ学会第6回大会	第一原理計算による Ti, Zr, Hf 水素化物の弾性特性	佐原 亮二 土屋 文 水関 博志 永田 晋二 四竈 樹男 川添 良幸
2008/6/25	ポスター発表 MH2008	Theoretical analysis of structural, electronic, and mechanical properties in metal hydrides	R.Sahara B.Tsuchiya H.Mizuseki S.Nagata T.Shikama Y.Kawazoe
2008/7/7	ポスター発表 ICGH2008	Accurate Description of Phase Diagram of Clathrate Hydrates on Molecular Level	V.Belosludov O.Subbotin R.Belosludov H.Mizuseki Y.Kawazoe

2008/7/9	口頭発表 ICGH200	Accurate Description of Guest-Guest and Guest-Interactions in Hydrogen Clathrate: Role of Help Gas on Stability of Water Hydrate Framework	R.Belosludov H.Mizuseki Y.Kawazoe V.Belosludov
2008/7/10	ポスター発表 ICGH2008	Competition between Intermolecular Interaction and Configuration Entropy as the Structure-Determining Factor for Inclusion Compounds	O.Subbotin V.Belosludov T.Adamova R.Belosludov Y.Kawazoe J.Kudo
2008/8/11	ポスター発表 US-Japan POLYMAT 2008 Summit	Hydrogen Adsorption over Lithium-functionalized Calixerenes	V.Natarajan Sathiyamoorthy H.Mizuseki Y.Kawazoe
2008/9/10	口頭発表 3rd NEDO-AIST-LANL Workshop on Fuel Cell Performance Improvement & Hydrogen Storage Materials	Accurate Description of Guest-Guest and Guest-Host Interactions in Hydrogen Clathrate: Role of Help Gas on Stability of Water Framework	H.Mizuseki
2008/9/24	口頭発表 日本金属学会 2008 年秋 期大会	Ab Initio Study on Improving the Hydrogen Absorption of MOFs	V.Natarajan Sathiyamoorthy H.Mizuseki Y.Kawazoe
2008/10/28	ポスター発表 5th International Congress Nano Bio Clean Tech 2008	Molecular Level Description of Thermodynamics Properties of Hydrogen Clathrate Hydrate: Theoretical Aspects of Hydrogen Storage Application	R.Belosludov O.Subbotin H.Mizuseki V.Belosludov Y.Kawazoe
2008/11/4	招待講演 AsiaNano2008	Prospect for Improved Hydrogen Storage Materials	H.Mizuseki V.Natarajan Sathiyamoorthy R.Sahara

			Y.Kawazoe
2008/11/4	招待講演 AsiaNano2008	Thermodynamics and Hydrogen Storage Ability of Mixed Hydrogen + Help Gas Clathrate Hydrate	V.Belosludov
2008/11/5	口頭発表 AsiaNano2008	Theoretical Study of Structural, Electronic, and Mechanical Properties in Metal Hydrides	R.Sahara B.Tsuchiya H.Mizuseki S.Nagata T.Shikama Y.Kawazoe
2008/11/6	ポスター発表 AsiaNano2008	Structural Optimization by TOMBO: Case Study of Hydrides and Molecules	R.Sahara O.Kikegawa S.Bahramy R.Note H.Mizuseki M.Sluiteer Y.Kawazoe
2008/11/6	ポスター発表 AsiaNano2008	Adsorbed Hydrogen Atoms on Graphene Producing Star-Like STM Images	M.Khazaei M.Bahramy A.Ranjbar H.Mizuseki Y.Kawazoe
2008/11/27	ポスター発表 東北大学・金属材料研究 所講演会	Structural Optimization by TOMBO: Case Study of Hydrides and Molecules	R.Sahara O.Kikegawa S.Bahramy R.Note H.Mizuseki M.Sluiteer Y.Kawazoe
2008/11/27	ポスター発表 東北大学・金属材料研究 所講演会	Adsorbed Hydrogen Atoms on Graphene Producing Star-Like STM Images	M.Khazaei M.Bahramy A.Ranjbar H.Mizuseki Y.Kawazoe
2008/11/30	口頭発表 日本金属学会東北支部	第一原理計算プログラムパッケ ージ TOMBO を用いた水素吸	亀卦 川理 佐原 亮二

	大会	蔵材料に対する全電子混合基底計算	水関 博志 大野 かおる M.Sluiser 川添 良幸
2008/12/3	口頭発表 MRS Fall 2009	Binding Energy Estimation by TOhoku Mixed-Basis Orbitals Method (TOMBO): Case Study of Hydrogen Storage Materials	R.Sahara M.Iwamoto O.Kikegawa B.Saeed R.Note H.Mizuseki M.Sluiser Y.Kawazoe
2008/12/9	ポスター発表 Computational Science Workshop 2008	Hydrogen Storage on Organic Host	V.Natarajan Sathiyamoorthy R.Sahara H.Mizuseki Y.Kawazoe
2008/12/9	ポスター発表 Computational Science Workshop 2008	Theoretical Study of Thermodynamics Properties of Hydrogen Clathrate Hydrate	R.Belosludov O.Subbotin H.Mizuseki V.Belosludov Y.Kawazoe
2009/1/4	ポスター発表 Hydrogen and Hydrogen Storage Methods and Materials	Hydrogen Adsorption over Lithium-Functionalized Calix[4]arenes	V.Natarajan Sathiyamoorthy R.Sahara H.Mizuseki Y.Kawazoe
2009/1/24	口頭発表 ナノ学会 ナノ構造・物性部会 第1回シンポジウム	第一原理計算によるリチウムを付加したカリックスアレーンの水素貯蔵研究	V.Natarajan Sathiyamoorthy 佐原 亮二 水関 博志 川添 良幸
2009/1/27	ポスター発表 3rd Symposium Hydrogen and Energy	Structural Optimization by TOMBO: Case Study of Hydrides and Molecules	R.Sahara O.Kikegawa R.Note H.Mizuseki

			K.Ohno M.Sluiteer Y.Kawazoe
2009/2/16	ポスター発表 ACCMS-VO3	Hydrogen storage on Li functionalized MOFs and organic hosts	V.Natarajan Sathiyamoorthy R.Sahara H.Mizuseki Y.Kawazoe
2009/2/16	ポスター発表 ACCMS-VO3	Molecular adsorption of H ₂ on nickel clusters	V.Natarajan Sathiyamoorthy V.Kumar R.Sahara H.Mizuseki Y.Kaazoe
2009/2/16	ポスター発表 ACCMS-VO3	Theoretical study on hydrogen storage materials by all-electron mixed-basis program TOMBO	O.Kikegawa R.Sahara H.Mizuseki K.Ohno M.Sluiteer Y.Kawazoe
2009/3/29	基調講演 日本金属学会 2009 年春 期大会	第一原理計算による新水素吸蔵 材料の提案	川添良幸 水関博志 佐原亮二 R.Belosludov
2009/3/29	口頭発表 日本金属学会 2009 年春 期大会	Hydrogen Storage on MOFs and Organic Hosts	V.Natarajan Sathiyamoorthy 水関 博志 佐原 亮二 川添 良幸
2009/3/29	口頭発表 日本金属学会 2009 年春 期大会	Theoretical Study of Hydrogen Clathrate Hydrate as Hydrogen Storage Material	R.Belosludov 水関 博志 川添 良幸 O.Subbotin V.Belosludov

(中性子 G:高エネルギー加速器研究機構)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2008/5/23-5/24	ポスター発表 NEDO 成果発表シ ンポジウム	Total Neutron Diffractometer for Research on Advanced Hydrogen Storage Material	三沢 正勝 大下 英敏
2008/7/11	日本学術振興会 133 委員会(材料の微細 組織と機能性)198 回研究会	中性子を利用したアモルファス・不規 則構造材料の構造解析について	鈴谷 賢太郎
2008/8/26	口頭発表 (招待講 演) 国際結晶学会(IUCr 2009)	New opportunity to explore noncrystalline materials by neutron total diffractometer (NOVA) at J-PARC	大友 季哉
2008/9/8	口頭発表 AIST-NEDO-LANL workshop	High Intensity Total Diffractometer (NOVA) for Hydrogen Storage Materials	大友 季哉
2008/9/21	口頭発表 日本物理学会 2008 年秋季大会	GEM を用いた中性子検出器の開発	大下 英敏 氏家 宣彦 宇野 彰二 大友 季哉 関本 美知子 田中 秀治 田中 真伸 仲吉 一男 村上 武 長屋 慶 小池 貴久 内田 智久 中野 英一 杉山 晃
2008/10/17	口頭発表 第 2 回 水素貯蔵材 料先端基盤研究事 業技術検討会議	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 季哉
2008/12/1	ポスター発表 第 8 回中性子科学会 年会	高強度全散乱装置 NOVA の現状	鈴谷 賢太郎 社本 真一 高田 慎一

			大友 季哉 三沢 正勝 金子 直勝 大下 英敏 佐藤 節夫 神山 崇 清水 裕彦 宇野 彰二 田中 真伸 安 芳次 仲吉 一男 武藤 豪 猪野 隆 福永 俊晴 伊藤 恵司 杉山 正明 森 一広 亀田 恭男 山口 敏男 吉田 亨次 川北 至信 丸山 健二
2008/12/1	ポスター発表 第8回中性子科学会 年会	J-PARC 高強度全散乱装置における中 性子検出器の開発	大下 英敏 大友 季哉 宇野 彰二 金子 直勝 三沢 正勝 村上 武 武藤 豪 佐藤 節夫 関本 美知子 鈴谷 賢太郎 内田 智久 小池 貴久 長屋 慶

2008/12/12	口頭発表 第5回 Micro Pattern Gas Detector 研究会	GEM を用いた中性子検出器の開発	大下 英敏 宇野 彰二 大友 季哉 村上 武 関本 美知子 小池 貴久 長屋 慶 中野 英一 内田 智久
2009/2/24	口頭発表 水素貯蔵材料フォー ラム	高強度中性子全散乱装置 (NOVA) の 開発と水素貯蔵放出メカニズムの基 盤研究展開	大友 季哉
2009/3/14	口頭発表 The 1st International conference on Technology and Instrumentation in Particle Physics (TIPP09)	Development of a neutron detector with a boron-coated GEM	大下 英敏 宇野 彰二 大友 季哉 村上 武 佐藤 節夫 関本 美知子 小池 貴久 内田 智久
2009/3/24-25	ポスター発表 第26回 PF シンポジ ウム	高強度全散乱装置 (NOVA)	大友 季哉
2009/3/30	口頭発表 日本物理学会第64 回年次大会	高強度中性子全散乱装置(NOVA)の建 設	大友 季哉 三沢 正勝 鈴谷 賢太郎 金子 直勝 大下 英敏 福永 俊晴 伊藤 恵司 森 一広 杉山 正明 亀田 恭男 山口 敏男 吉田 亨次 川北 至信 丸山 健二

			社本 真一 高田 慎一 佐藤 節夫 武藤 豪 鈴木 純一 安 芳次 仲吉 一男 宇野 彰二 田中 真伸
2009/3/30	口頭発表日本物理学会第64回年次大会	GEMを用いた中性子ビームモニターの開発	大下 英敏 宇野 彰二 大友 季哉 関本 美知子 村上 武 長屋 慶 小池 貴久 内田 智久 中野 英一
2009/3/6	口頭発表 KEK DAQワークショップ2009	中性子検出器読み出し (GEM)	大下 英敏 宇野 彰二 大友 季哉 村上 武 関本 美知子 小池 貴久 内田 智久

平成21年度【88件(G内での重複除く)】

(金属系 G:産業技術総合研究所)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2009/4/10	The 4th China-Japan Seminar on Hydrogen Storage Materials 講演	Nano-structure and hydrogenation reaction of Mg ₅₀ Co ₅₀ BCC alloy prepared by ball-milling	松田 潤子 Huaiyu Shao 中村 仁 中村 優美子 秋葉 悦男
2009/4/11	HYDROGEN SYMPOSIUM 2009 講演	Hydrogen and Storage Experience and Future	秋葉 悦男
2009/4/11	The 4th China-Japan Seminar on Hydrogen Storage Materials 講演	Introduction of HYDRO★STAR Project	秋葉 悦男
2009/4/15	レアアース交流会 議シンポジウム 講演	水素吸蔵合金の技術動向につい て	秋葉 悦男
2009/4/20	陽電子ビーム利用 材料評価コンソー シアム総会・研究会 講演	陽電子消滅法の水素吸蔵合金へ の応用	榊 浩司 中村 優美子 秋葉 悦男
2009/4/22	IEA HIA Task 22 expert meeting 講演	Characterization of Mg-Co alloy and hydride using TEM and neutron total scattering	中村 優美子 松田 潤子 中村 仁 Shao Huaiyu 秋葉 悦男
2009/5/11	4th UK-Japan Workshop on Solid-State Hydrogen Storage 講演	Japanese National Projects and Hydrogen Absorbing Alloys	秋葉 悦男 Shao Huaiyu 松田 潤子 中村 仁 浅野 耕太 中村 優美子

2009/5/13	第16回燃料電池シンポジウム 講演	金属系水素貯蔵材料の「その場観察」粉末回折法を用いた構造解析	中村 優美子 中村 仁 岩瀬 謙二 秋葉 悦男 Hyunjeong Kim Thomas Proffen
2009/5/14	平成21年度総会特別講演会 講演	水素貯蔵材料先端基盤研究事業における材料研究の進捗	秋葉 悦男
2009/5/29	日本顕微鏡学会第65回学術講演会 講演	LaNi ₅ 系金属間化合物の水素吸蔵放出反応と転位形成	松田 潤子 中村 優美子 秋葉 悦男
2009/6/26	第4回新エネルギー世界展示会 講演	自動車への水と搭載技術の現状と展望	秋葉 悦男
2009/7/12	Gordon Research Conference 講演	Material Research and System Development in Japan	秋葉 悦男
2009/7/13	Gordon Research Conference ポスター発表	Crystal and Local structures of (Mg,Ca)Ni ₂ D _x	中村 優美子 寺下 尚克 Hynjeong Kim Thomas Proffen Bjorn Hauback 秋葉 悦男

(非金属系 G: 広島大学)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2009/4/10-14	口頭発表 4th China - Japan Seminar on Hydrogen Storage Materials, China	Research and Development of Nano-Composite Materials for Hydrogen Storage	Y. Kojima
2009/4/19-23	口頭発表 Fundamental and applied hydrogen storage materials development Task 22 IEA HIA EXPERT MEETING, Korea	Basic Research of Nano-Composite Materials for Hydrogen Storage (H-38)	Y. Kojima
2009/5/10-13	口頭発表 4th UK - Japan Workshop on	Research and Development of Nano-Composite Materials for Hydrogen Storage	Y. Kojima

	Solid-State Hydrogen Storage, Sendai		
2009/5/10-13	ポスター発表 4th UK - Japan Workshop on Solid-State Hydrogen Storage, Sendai	Cyclic hydrogen storage system composed of ammonia and metal hydride	H.Miyaoka H. Yamamoto S. Hino M. Tsubota T. Ichikawa Y. Kojima
2009/5/10-13	ポスター発表 4th UK - Japan Workshop on Solid-State Hydrogen Storage, Sendai	Thermal diffusivity of light metal amides by the temperature wave analysis	B. Paik M. Tsubota T. Ichikawa Y. Kojima
2009/5/10-13	ポスター発表 4th UK - Japan Workshop on Solid-State Hydrogen Storage, Sendai	Hydrogen storage properties and characterization of ball-milled $\text{ScH}_2\text{-MB}_n$ (M=Mg, Ca) systems	K. Shimoda T. Nakagawa T. Ichikawa Y. Kojima
2009/5/10-13	ポスター発表 4th UK - Japan Workshop on Solid-State Hydrogen Storage, Sendai	Synthesis of high purity and/or single-crystal hydrides	M. Tsubota B. Paik S. Hino T. Ichikawa Y. Kojima
2009/5/10-13	ポスター発表 4th UK - Japan Workshop on Solid-State Hydrogen Storage, Sendai	Alkali metal amidoboranes: hydrogen storage properties and mechanism for H_2 release	Y. Zhang R. Matin T. Ichikawa Y. Kojima
2009/5/10-13	ポスター発表 4th UK - Japan Workshop on Solid-State Hydrogen Storage, Sendai	Interaction between LiH surface and ammonia: ab initio molecular-dynamics simulation	A. Yamane F. Shimojyo K. Hoshino
2009/6/24	口頭発表 機械関連工業・設計業情報交換会、広島市	水素エネルギー利用について	小島由継
2009/7/12-17	ポスター発表 GRC	X-ray Photoemission Spectroscopy Study for Lithium Hydride	M. Tsubota K. Nakamura M. Nakatake S. Hino T. Ichikawa Y. Kojima
2009/7/12-17	ポスター発表 GRC	Characterization of ball-milled hydrogen storage materials by multi-nuclear solid state NMR spectroscopy	K. Shimoda Y. Kojima T. Ichikawa T. Nakagawa T. Ono

(非金属系 G:北海道大学)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2009/5/11	口頭発表 UK-Japan Workshop on Hydrogen Materials、東北大、仙 台	Variable Temperature Neutron Diffraction Studies of Single Crystals of LiND ₂	Shigehito Isobe
2009/5/28	口頭発表 日本顕微鏡学会学術講 演会、仙台	その場 TEM 観察による NaAlH ₄ 水素貯蔵材料の分 解過程におけるナノ構造変 化	川崎 洋 磯部 繁人 Yao Hao 橋本 直幸 大貫 惣明
2009/5/28	口頭発表 日本顕微鏡学会学術講 演会、仙台	環境セルによる LiH 系、 NaH 系水素吸蔵材料の反応 過程の観察	王 永明 平澤 寛子 磯部 繁人 橋本 直幸 大貫 惣明 市川 貴之 小島 由継
2009/7/24	口頭発表 日本鉄鋼協会・日本金 属学会両北海道支部合 同夏季講演大会、室蘭	電子顕微鏡のその場観察に よる LiH 系、NaH 系水素吸 蔵材料の分解反応	平澤 寛子 磯部 繁人 王 永明 橋本 直幸 大貫 惣明 市川 貴之 小島 由継
2009/7/24	口頭発表 日本鉄鋼協会・日本金 属学会両北海道支部合 同夏季講演大会、室蘭	Structural Change of NaAlH during in-situ heating in HVEM	Yao Hao Shigeto Isobe Yongming Wang Naoyuki Hashimoto Somei Ohnuki
2009/7/24	口頭発表 日本鉄鋼協会・日本金 属学会両北海道支部合 同夏季講演大会、室蘭	電子顕微鏡その場観察によ る Mg 系材料の水素化反応 と触媒効果の検討	小野 晃史 磯部 繁人 王 永明 橋本 直幸 大貫 惣明

(非金属系 G:上智大学)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2009/5/10-13	ポスター発表 4th UK - Japan Workshop on Solid-State Hydrogen Storage, Sendai	Electrochemical hydrogen charge for Magnesium and Aluminum	Nobuko Hanada, Hiroshi Suzuki Kenichi Takai
2009/7/12-17	ポスター発表 GRC	The existing state of hydrogen in electrochemically charged aluminum	Hiroshi Suzuki Ryo Hanawa Nobuko Hanada Kenichi Takai Yukito Hagihara
2009/7/12-17	ポスター発表 GRC	Electrochemical hydrogen charge for the formation of Magnesium and Aluminum hydrides in non-aqueous solution	Nobuko Hanada Ryo Hanawa Hiroshi Suzuki Kenichi Takai

(材料物性 G: 日本原子力研究開発機構)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2009/6/17	口頭発表 5th International Workshop on Reactions Involving Oxygen & Hydrogen	Depth-profiling at BL23SU applying the maximum entropy technique to angular-specific photoelectron spectra	J.Harries
2009/6/17	口頭発表 5th International Workshop on Reactions Involving Oxygen & Hydrogen	SR-XPS study on native oxide of VCrTi and its modification by deuterium ion implantation	戸出 真由美
2009/7	ポスター発表 Gordon Research Conference on Hydrogen-Metal Systems	Formation and decomposition of AlH ₃ in the aluminum-hydrogen system	齋藤 寛之
2009/7	ポスター発表 Gordon Research Conference on Hydrogen-Metal Systems	Pressure-induced phase separation of rare-earth metal hydrides	A. Machida
2009/7	ポスター発表 Gordon Research Conference on Hydrogen-Metal Systems	Observation of Pressure-induced Disproportionation Reaction of LaH ₂ Using Infrared Reflection and Raman	Y. Sakurai

		Spectroscopies	
2009/7	ポスター発表 International Conference on the Applications of Mössbauer Effect 2009		R. Masuda
2009/7/28	ポスター発表 International Conferences on High Pressure Science and Technology (Joint AIRAPT-22 & HPCJ-50 Conference)	In situ X-ray diffraction measurement on the hydrogenation and dehydrogenation of aluminum at high pressure and temperature	H. Saitoh A. Machida Y. Katayama K. Aoki
2009/7/28	ポスター発表 International Conferences on High Pressure Science and Technology (Joint AIRAPT-22 & HPCJ-50 Conference)	High pressure Raman and visible absorption study of TbH ₃	T.Kume N.Shimura S.Sasaki H.Shimizu A.Machida T.Watanuki K.Aoki K.Takemura
2009/7/29	口頭発表 International Conferences on High Pressure Science and Technology (Joint AIRAPT-22 & HPCJ-50 Conference)	Pressure-Induced Magnetic Transition of Iron Hydride	N.Hirao T.Mitsui Y.Ohishi M.Seto K.Aoki K.Takemura
2009/7/29	ポスター発表 International Conferences on High Pressure Science and Technology (Joint AIRAPT-22 & HPCJ-50 Conference)	For High-Pressure Neutron Experiments Using Total Scattering Diffractometer NOVA at J-PARC	T.Hattori Y.Katayama A.Machida T.Otomo K.Suzuya
2009/7/30	ポスター発表 International Conferences on High	Pressure induced phase separation of rare-earth metal dihydrides	A.Machida T.Watanuki D.Kawana

	Pressure Science and Technology (Joint AIRAPT-22 & HPCJ-50 Conference)		K.Aoki
2009/7/30	ポスター発表 International Conferences on High Pressure Science and Technology (Joint AIRAPT-22 & HPCJ-50 Conference)	Observation of Pressure-induced Disproportionation Reaction of LaH ₂ Using Vibrational Spectroscopies	Y.Sakurai A.Machida K.Aoki
2009/7/31	口頭発表 International Conferences on High Pressure Science and Technology (Joint AIRAPT-22 & HPCJ-50 Conference)	Structure of liquid iron hydride under high pressure	Y. Katayama H. Saitoh Y. Yomogida K. Aoki
2009/7	ポスター発表 XAFS 14 Conference	Effect of Hydrogenation on the Electronic State of Metallic La hydrides Probed by X-ray Absorption Spectroscopy at the La L-edges	N. Ishimatsu R. Sasada H.Maruyama T. Ichikawa H. Miyaoka T. Kimura M. Tsubota Y. Kojima T.Tsumuraya T. Oguchi N.Kawamura A. Machida

(材料物性 G:兵庫県立大学)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2009/4/1	口頭発表 2009年春季第56回応用物理学関係連合講演会	FIB-CVD法で製膜したDLC薄膜に対するアニール効果	神田 一浩 岡田 真 姜 有志 松井 真二

(材料物性 G:高輝度光科学研究センター)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2009/7/29	口頭発表 International Conferences on High Pressure Science and Technology (Joint AIRAPT-22 & HPCJ-50 Conference)	Pressure-Induced Magnetic Transition of Iron Hydride	N. Hirao T. Mitsui Y. Ohishi M. Seto K. Aoki K. Takemura

(材料物性 G:広島大学理学研究科)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2009/7	ポスター発表 XAFS 14 Conference	Effect of Hydrogenation on the Electronic State of Metallic La hydrides Probed by X-ray Absorption Spectroscopy at the La L-edges	N.Ishimatsu R.Sasada H.Maruyama T.Ichikawa H.Miyaoka T.Kimura M.Tsubota Y.Kojima T.Tsumuraya T.Oguchi N.Kawamura A.Machida

(材料物性 G:岐阜大学)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2009/7/28	ポスター発表 International Conference on High Pressure Science and Technology (AIRAPT22& HPCJ-50) (Tokyo, Japan)	High pressure Raman and visible absorption study of TbH3	T.Kume N.Shimura S.Sasaki H.Shimizu A.Machida T.Watanuki K.Aoki K.Takemura

(材料物性 G:東北大学 大学院工学研究科)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2009/5/12	口頭発表 4th UK-Japan Workshop on Solid-State Hydrogen Storage	Development of environment controllable NMR system for hydrogen storage materials	高村 仁 橋本 真一 前川 英己

(計算科学 G:産業技術総合研究所 計算科学研究部門)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2009/4/11	4th China - Japan Seminar on Hydrogen Storage Materials (中国 広州市)	First principles analysis on hydrogen hopping in hydrogen storage materials	H. Ogawa
2009/5/11	4th UK - Japan Workshop on Solid-State Hydrogen Storage (仙台)	Atomistic simulation on hydrogen storage in metallic nanoparticles	H. Ogawa A. Tezuka H. Wang T. Ikeshoji M. Katagiri
2009/5/11	4th UK - Japan Workshop on Solid-State Hydrogen Storage (仙台)	First principles study on thermodynamic stability and hydrogen atom hopping in NaAlH ₄	H. Wang A. Tezuka H. Ogawa T. Ikeshoji
2009/5/11	4th UK - Japan Workshop on Solid-State Hydrogen Storage (仙台)	BCC タイプ V-M 水素貯蔵合 金の第一原理計算	田中 喜典 ツェロラス バシリ オス 小野寺 秀博 片桐 昌彦 小川 浩
2009/5/11	4th UK - Japan Workshop on Solid-State Hydrogen Storage (仙台)	LaNi ₅ -H のフォノンと熱力 学特性の理論研究	斎藤 繁喜 片桐 昌彦 小川 浩
2009/5/11	4th UK - Japan Workshop on	RNi ₅ (R=希土類)の水素貯蔵 のモンテカルロ・シミュレー	中村 淳 竹内 靖

	Solid-State Hydrogen Storage (仙台)	シヨン	片桐 昌彦 小川 浩
2009/5/11	ナノ学会 第7回大会	V基 BCC 水素貯蔵材料における添加元素効果	田中 喜典 片桐 昌彦 小野 寺秀博 小川 浩
2009/5/11	ナノ学会 第7回大会	水素貯蔵材料における P-C-T 曲線のモデル化	ツェロラス バシリ オス 片桐 昌彦 小川 浩
2009/6/28	IUMRS-ICA 2009	Structural Stability in Hydrogen-Storage Materials	M. Katagiri H. Onodera H. Ogawa
2009/7/15	Gordon Research Conference - Hydrogen-Metal Systems (Ciocco, Barga, Italy)	Simulation of Hydrogen Dynamics in Metallic Nanoparticles	Hiroshi Ogawa Megumi Kayanuma Tamio Ikeshoji

(計算科学 G:物質・材料研究機構)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2009/5/11	ポスター発表 ナノ学会第7回大会	A Modelling Approach for Calculating P-C-T Curves of Hydrogen Storage Materials	V.Tserolas M.Katagiri H.Ogawa
2009/5/11	ポスター発表 ナノ学会第7回大会	Doping Effect on V Based BCC Type Hydrogen Storage Materials	Y.Tanaka M.Katagiri H.Onodera H.Ogawa
2009/5/11	ポスター発表 ナノ学会第7回大会	Theoretical Study of Phonon and Thermodynamic Properties of RNi ₅ -H (R=Rare-earth)	M.Katairi S.Saito
2009/5/11	4th UK - Japan Workshop on Solid-State Hydrogen Storage	Theoretical Study of Phonon and Thermodynamic Properties of LaNi ₅ -H	S.Saito M.Katagiri H.Ogawa

2009/5/11	4th UK - Japan Workshop on Solid-State Hydrogen Storage	Monte Carlo Simulation of Hydrogen Storage in RNi_5 (R = Rare Earth)	J.Nakamura Y.Takeuchi M. Katagiri H. Ogawa
2009/5/11	4th UK - Japan Workshop on Solid-State Hydrogen Storage	First Principle Study on BCC-type V-M Hydrogen Storage Materials	Y.Tanaka M.Katagiri H.Onodera H.Ogawa
2009/6/28	ポスター発表 IUMRS-ICA 2009	First Principles Calculation of Phonon and Thermodynamic Properties of $LaNi_5-H$	M.Katairi S.Saito
2009/6/28	ポスター発表 IUMRS-ICA 2009	Structural Stability in Hydrogen-Storage Materials	M.Katagiri H.Onodera H.Ogawa
2009/7/12	ポスター発表 Gordon Research Conference on Hydrogen-Metal Systems	Theoretical Study of Phonon and Thermodynamic Properties of $LaNi_5-H$	M.Katairi S.Saito
2009/7/12	ポスター発表 Gordon Research Conference on Hydrogen-Metal Systems	Computational Modelling of Pressure-Composition Isotherms for Hydrogen Storage Materials	V.Tserolas Y.Tanaka M.Katagiri H.Ogawa

(計算科学 G: 東北大学 金属材料研究所)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2009/4/11	口頭発表 4th China-Japan Seminar on Hydrogen Storage Materials	Theoretical Research for Improved Hydrogen Storage Materials	H. Mizuseki V. Natarajan Sathiyamoorthy R. Sahara Y. Kawazoe
2009/5/9	ポスター発表 ナノ学会第7回大会	Electronic Structure of Defected Graphane Structures	M. Khazaei M. S. Bahramy H. Mizuseki Y. Kawazoe
2009/5/9	ポスター発表	Hydrogen Storage on	V. Natarajan

	ナノ学会第7回大会	Organic Hosts	Sathiyamoorthy R. Sahara H. Mizuseki Y. Kawazoe
2009/5/9	ポスター発表 ナノ学会第7回大会	Theoretical Search for the Potential Hydrogen Storage Medium	G. Chen H. Mizuseki Y. Kawazoe
2009/5/9	ポスター発表 ナノ学会第7回大会	Theoretical Study of Hydrogen Hydrate as Hydrogen Storage Material: Role of Second Guest Component	R. V. Belosludov O. S. Subbotin H. Mizuseki V. R. Belosludov Y. Kawazoe
2009/5/10	ポスター発表 ナノ学会第7回大会	Ab initio Study of the Alkali-Metal Doped BN Fullerene as Hydrogen Storage Materials	V. Natarajan Sathiyamoorthy R. Sahara H. Mizuseki Y. Kawazoe
2009/5/11	ポスター発表 ナノ学会第7回大会	全電子混合基底法プログラ ム TOMBO による水素貯蔵 材料の結合エネルギー計算	佐原 亮二 亀卦川 理 水関 博志 Marcel H. F. Sluiter 大野 かおる 川添 良幸
2009/5/11	ポスター発表 4th UK - Japan Workshop on Solid-State Hydrogen Storage	Ab initio Study of the Alkali-Metal Doped BN Fullerene as Hydrogen Storage Materials	V. Natarajan Sathiyamoorthy R. Sahara H. Mizuseki Y. Kawazoe
2009/5/11	ポスター発表 4th UK - Japan Workshop on Solid-State Hydrogen Storage	Hydrogen Storage in Clathrate Hydrate: Theoretical Aspects	R. V. Belosludov O. S. Subbotin H. Mizuseki V. R. Belosludov Y. Kawazoe
2009/5/11	ポスター発表 4th UK - Japan Workshop on Solid-State Hydrogen	Theoretical Search for the Potential Hydrogen Storage Medium	G. Chen Y. Kawazoe

	Storage		
2009/5/11	ポスター発表 4th UK - Japan Workshop on Solid-State Hydrogen Storage	Theoretical Study on Metal Organic Frameworks by All-Electron Mixed-Basis Program TOMBO	R. Sahara H. Mizuseki K. Ohno M. Sluiter Y. Kawazoe
2009/5/12	口頭発表 4th UK - Japan Workshop on Solid-State Hydrogen Storage	Computational Materials Design for Improved Hydrogen Storage Materials	Y. Kawazoe H. Mizuseki
2009/5/15	口頭発表 金属材料研究所第 117 回 講演会	第一原理計算による水素貯 蔵材料研究	水関 博志
2009/6/11	ポスター発表 E-MRS	Theoretical Study on Metal Organic Frameworks by All-Electron Mixed-Basis Program TOMBO	R. Sahara O. Kikegawa H. Mizuseki K. Ohno M. Sluiter Y. Kawazoe
2009/7/13	ポスター発表 Gordon Research Conferences: Hydrogen-Metal Systems	Theoretical Study on Metal Organic Frameworks by All-Electron Mixed-Basis Program TOMBO	R. Sahara H. Mizuseki K. Ohno M. Sluiter Y. Kawazoe

(中性子 G: 高エネルギー加速器研究機構)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2009/4/9	口頭発表 学術創成研究「パルス中 性子源を活用した量子機 能発現機構に関する融合 研究」第 8 回研究会	High intensity total diffractometer	大友 季哉
2009/5/11	口頭発表 UK-Japan WS on Solid-State Hydrogen Storage	Construction of high intensity total diffractometer (NOVA) for hydrogen storage materials	大友 季哉

2009/7/2	口頭発表 成果報告シンポジウム	中性子全散乱装置 (NOVA) に よる水素貯蔵材料の構造解析	大友 季哉
2009/7	ポスター発表 Gordon Research Conference Hydrogen-Metal Systems	High intensity neutron total diffractometer (NOVA) for fundamental research of hydrogen storage materials	大友 季哉

プレスリリース【全4件】 平成20年度【3件】

タイトル	関連委託先	報道メディア等
「環境セル型電子顕微鏡による水素貯蔵反応の動的観察の成功」	広島大学 先進機能物質研究センター 北海道大学	中国新聞・科学新聞・室蘭民報 NHK 札幌総合 TV (2008年6月12日 18:40・20:55) オンライン記事： 東京新聞・中国新聞・西日本新聞・神戸新聞・四国新聞・共同通信・京都新聞・さきがけ 中国放送 RCC プロジェクト E タウン E タウンサイト (2009年1月31日 17:00~17:30・2009年2月1日 4:45~5:15) 「水素社会は今？廃棄したパン生地からも水素！広島での動きを徹底検証！！」
「クリーンな水素エネルギー社会実現へ向けた材料開発へ指針 -水素とアルミニウムの直接反応によるアルミニウム水素化物の合成に成功-	日本原子力研究開発機構	日経産業新聞、日刊工業新聞、化学工業日報、電気新聞、科学新聞、燃料電池新聞
世界初、室温でリチウム高速イオン伝導を示す水素化物の開発に成功	東北大学 大学院工学研究科	日経 NET (オンライン版、2009年1月23日) 日刊工業新聞 (2009年1月27日) 科学新聞 (2009年2月6日)

平成21年度【1件】

タイトル	関連委託先	報道メディア等
中性子全散乱装置(NOVA)完成披露式典	高エネルギー加速器研究機構	6/2 18:10~ニュースワイド茨城、 6/12 7:45~ 首都圏ニュース 日刊工業新聞、産経新聞、茨城新聞 (各紙の 6/3 朝刊)

受賞等【全7件】 平成19年度【1件】

受賞者	賞等の名称	受賞日
木村 通 磯部 繁人 日野 聡 市川 貴之 小島 由継	MH利用開発研究会 平成19年度シンポジウム (2007) 「優秀ポスター賞」 研究題目：「触媒添加したマグネシウムの水素 吸蔵反応速度」	

平成20年度【4件】

受賞者	賞等の名称	受賞日
秋葉 悦男	The Herbert C. Brown Award for Innovations in Hydrogen Research, Purdue University, April 2008.	2008/4/24
山本 ひかる 日野 聡 丹下 恭一 宮岡 裕樹 坪田 雅己 市川 貴之 小島 由継	MH利用開発研究会 平成20年度シンポジウム (2008) 「優秀ポスター賞」 研究題目：「カリウムを用いた新規水素貯蔵シ ステムの研究」	
小野寺 秀博	日本鉄鋼協会学術功績賞（合金の組織と特性の予 測）	2009/3/28
佐原 亮二	Best Poster Presenter Award, Second Working Group Meeting on Hydrogen Storage Materials of ACCMS	2008/11/6

平成21年度【2件】

受賞者	賞等の名称	受賞日
Khazaei Mohammad	ナノ学会第7回大会若手優秀発表賞	2009/5/10
一関 京子 川添 良幸 五十嵐 伸昭 佐原 亮二	日立ITユーザ会 小論文優良賞	2009/5/21
齋藤 寛之	日本高圧力学会奨励賞	2009/7/29

その他【全9件】 平成20年度【9件】

タイトル	関連委託先	備考
環境・エネルギー材料研究展でのポスター出展 (平成20年10月 於 産総研)	産業技術総合研究所 エネルギー技術研究部門	P L業務の一環
当該事業を紹介するパンフレットの増刷 (平成20年10月 於 産総研)	産業技術総合研究所 エネルギー技術研究部門	P L業務の一環
ニュースレターの発行(第2号、平成20年10月 於 産総研) (第3号、平成21年3月 於 産総研)	産業技術総合研究所 エネルギー技術研究部門	P L業務の一環
当該事業を紹介するリーフレットの作成と配布 (平成21年2月 於 FC-EXPO)	産業技術総合研究所 エネルギー技術研究部門	P L業務の一環
事業のウェブページの更新	産業技術総合研究所 エネルギー技術研究部門	P L業務の一環 http://unit.aist.go.jp/energy/hydro-star/
「Synchrotron radiation X-ray investigation on the formation and decomposition of AlH ₃ at high pressure and high temperature」	日本原子力研究開発機構	Journal of Synchrotron Radiation, Vol. 16, Part 1 (2009) に広告記事 (facility information) 掲載
水素貯蔵材料の計算機シミュレーション	産業技術総合研究所 計算科学研究部門	第5回国際水素・燃料電池展 (FC Expo 2009) , 2009.2.25-27, 東京 イベント展示
水素誘起非晶質化のアニメーション	物質・材料研究機構	FC-EXPO2009 にて公開
高強度中性子全散乱装置 (NOVA)のコンピューターグラフィックムービー	高エネルギー加速器研究機構	第5回国際水素・燃料電池展 (FC Expo 2009) , 2009.2.25-27, 東京 イベント展示

平成 19 年度
水素貯蔵材料先端基盤研究事業 (Hydro☆Star)
活動記録

※=参加グループ名

2007 年 6 月 14 日

第 1 回 水素貯蔵材料先端基盤研究事業技術検討会議 (キックオフミーティング)

会 場：産業技術総合研究所 つくばセンター (つくば)

※プロジェクト全体

2007 年 6 月 14 日

第 1 回 中性子サブグループ会議

会 場：産業技術総合研究所 つくばセンター (つくば)

※中性子グループ

2007 年 8 月 28 日

第 1 回材料物性グループ会議

会 場：日本原子力研究開発機構 (兵庫県佐用町)

※材料物性グループ

2007 年 8 月 31 日

第 1 回 中性子サブグループ・GEM 検出器開発打ち合わせ

会 場：高エネルギー加速器研究機構 (つくば)

※中性子グループ

2007 年 9 月 6 日～7 日

第 2 回 中性子サブグループ会議

会 場：日本原子力研究機構 J-PARC センター (茨城県東海村)

※中性子グループ

2007 年 9 月 26 日

平成 19 年度 第 1 回 三者推進会議

会 場：広島大学 (東広島市)

※非金属系グループ

2007 年 9 月 25 日

第 1 回 中性子サブグループ・計算機仕様打ち合わせ

会 場：高エネルギー加速器研究機構 (つくば)

※中性子グループ

2007 年 9 月 27 日

第 1 回 材料物性グループ JAEA 研究連絡会議

会 場：日本原子力研究開発機構 (兵庫県佐用町)

※材料物性グループ (JAEA メンバー+JASRI 大石)

2007年10月1日

第1回 水素貯蔵材料先端基盤研究事業 サブリーダー会議

会場：産業技術総合研究所 つくばセンター（つくば）

※サブリーダー全体

2007年10月9日

第1回 中性子サブグループ・RMC 検討会議

会場：高エネルギー加速器研究機構（つくば）

※中性子グループ

2007年10月16日

第2回 中性子サブグループ・RMC 検討会議

会場：高エネルギー加速器研究機構（つくば）

※中性子グループ

2007年10月29日～11月1日

Workshop on Fuel Cell Performance Improvement & Hydrogen Storage Materials

会場：10月29日～30日 ホテルグランパシフィックメリディアン（お台場）

10月31日～11月1日 東京国際交流間（お台場）

※プロジェクト全体・ロスアラモス国立研究所

2007年10月31日

第2回 水素貯蔵材料先端基盤研究事業 サブリーダー会議

会場：産業技術総合研究所臨海副都心センター（お台場）

※サブリーダー全体

2007年11月2日

第1回 AIST-LANL 水素貯蔵材料セミナー

会場：産業技術総合研究所 つくばセンター（つくば）

※プロジェクト全体・ロスアラモス国立研究所

2007年11月2日

第2回 JAEA 研究連絡会議

会場：日本原子力研究開発機構（兵庫県佐用町）

※材料物性グループ（JAEA メンバー）

2007年11月16日

第2回 中性子サブグループ・計算機仕様 打ち合わせ

会場：高エネルギー加速器研究機構（つくば）

※中性子グループ

2007年11月19日～20日

水素貯蔵材料先端基盤研究事業 第1回 計算科学グループ会議

会場：ホテル大観荘（宮城県松島町）

※計算科学グループ

2007年11月22日

第1回 水素化物の光電子分光実験に関する打ち合わせ

会場：日本原子力研究開発機構（兵庫県佐用町）

※非金属系グループ・材料物性グループ

2007年11月29日

第3回 中性子サブグループ検討会議

会場：九州大学（箱崎）

※中性子グループ

2007年12月3日

第3回 JAEA 研究連絡会議

会場：日本原子力研究開発機構（兵庫県佐用町）

※材料物性グループ（JAEA メンバー）

2008年1月10日

第3回 水素貯蔵材料先端基盤研究事業 サブリーダー会議

会場：日本原子力研究開発機構 テクノ交流会館 RICOTTI（茨城県東海村）

※サブリーダー全体

2008年1月10日～11日

International Workshop on Structural Analyses Bridging over between Amorphous and Crystalline Materials (SABAC2008)

会場：日本原子力研究開発機構 テクノ交流会館 RICOTTI（茨城県東海村）

※プロジェクト全体・ロスアラモス国立研究所

2008年1月16日

第1回金属系グループ進捗ミーティング

会場：産業技術総合研究所 つくばセンター（つくば）

※金属系グループ

2008年1月18日

水素貯蔵材料に関するセミナー

会場：産業技術総合研究所 つくばセンター（つくば）

※金属系グループ・計算科学グループ

2008年1月24日

金属系グループ・計算科学グループ意見交換会

会場：産業技術総合研究所 つくばセンター（つくば）

※金属系グループ・計算科学グループ

2008年1月28日

第4回 JAEA 研究連絡会議

日本原子力研究開発機構（兵庫県佐用町）

※材料物性グループ（JAEA メンバー）

2007年2月6日

第2回 水素化物の光電子分光実験に関する打ち合わせ

広島大学（東広島市）
※非金属系グループ・材料物性グループ

2008年2月13日～14日

第2回 AIST-LANL 水素貯蔵材料セミナー
ロスアラモス国立研究所（米国ニューメキシコ州）
※プロジェクト全体・ロスアラモス国立研究所

2008年2月26日

第3回 日中水素貯蔵材料セミナー
産業技術総合研究所臨海副都心センター（お台場）
※プロジェクト全体

2008年2月27日

第1回 国際水素貯蔵フォーラム
東京国際交流センター（お台場）
※プロジェクト全体

2008年3月3日

第2回 計算科学グループ会議
産業技術総合研究所つくばセンター（つくば）
※計算科学グループ

2008年3月4日

第2回材料物性グループ会議
日本原子力研究開発機構 放射光物性研究棟附属建屋萌光館（兵庫県佐用町）
※材料物性グループ

2008年3月6日

NEDO 玉生主査による研究進捗ヒアリング
日本原子力研究開発機構 放射光物性研究棟（兵庫県佐用町）
※材料物性グループ（町田 SL、青木シニアサイエンティストが対応）

平成 20 年度
水素貯蔵材料先端基盤研究事業 (Hydro☆Star)
活動記録

※=参加グループ名

2008 年 4 月 14 日

第 3 回 水素化物の光電子分光実験に関する打ち合わせ

会 場：高輝度光科学研究センター(SPring-8) (兵庫県佐用町)

※非金属系グループ・材料物性グループ

2008 年 5 月 26 日

第 1 回 水素貯蔵材料先端基盤研究事業 推進助言委員会

会 場：川崎日航ホテル (川崎)

※プロジェクト全体

2008 年 5 月 26 日

第 4 回 水素貯蔵材料先端基盤研究事業 サブリーダー会議

会 場：新エネルギー・産業技術総合開発機構 (川崎)

※サブリーダー全体

2008 年 6 月 23 日～26 日

平成 19 年度研究成果報告シンポジウム

会 場：明治大学アカデミーコモン (東京)

※プロジェクト全体

2008 年 7 月 24 日

第 3 回 計算科学グループつくばメンバー・ミーティング

会 場：物質・材料研究機構 (つくば)

※計算科学グループ

2008 年 8 月 28 日

第 4 回 計算科学グループつくばメンバー・ミーティング

会 場：産業技術総合研究所つくばセンター (つくば)

※計算科学グループ・中性子グループ

2008 年 9 月 8～11 日

第 3 回 LANL-NEDO-AIST ワークショップ

会 場：シェラトン・サンディエゴ・ホテル&マリーナ (米国、サンディエゴ)

※プロジェクト全体・ロスアラモス国立研究所

2008 年 9 月 11 日

第 5 回 水素貯蔵材料先端基盤研究事業 サブリーダー会議

会 場：シェラトン・サンディエゴ・ホテル&マリーナ (米国、サンディエゴ)

※サブリーダー全体

2008年10月9～10日

第3回 計算科学グループ全体会議

会場：ホテル松島大観荘（宮城県松島町）

※計算科学グループ

2008年10月17日

第2回 水素貯蔵材料先端基盤研究事業技術検討会議

会場：上智大学（東京）

※プロジェクト全体

2008年10月17日

第3回 材料物性グループ会議

会場：上智大学（東京）

※材料物性グループ

2008年11月13日

第1回 軟X線XAFS実験に関する打ち合わせ

会場：兵庫県立大学 高度産業科学技術研究所（NewSUBARU）（兵庫県赤穂郡）

※非金属系グループ・材料物性グループ

2008年11月17日

第1回 中性子散乱実験に関する打ち合わせ

会場：日本原子力研究開発機構本部（茨城県東海村）

※非金属系グループ・中性子グループ

2008年12月15日

第1回 ランタン重水素化物合成に関する打ち合わせ

会場：広島大学 自然科学研究支援開発センター（東広島市）

※非金属系グループ・材料物性グループ

2009年1月9日

第6回 水素貯蔵材料先端基盤研究事業 サブリーダー会議

会場：産業技術総合研究所 東京本部（東京）

※サブリーダー全体

2009年1月21日

第2回 金属系グループ進捗ミーティング

会場：産業技術総合研究所 つくばセンター（つくば）

※金属系グループ

2009年2月3日

中性子を用いた水素貯蔵材料の構造解析に関する検討会

会場：J-PARC 物質・生命科学研究所施設、

いばらき量子ビーム研究センター（茨城県東海村）

※金属系グループ・中性子グループ・ロスアラモス国立研究所

2009年2月24日

水素貯蔵材料フォーラム2009

会 場：東京国際交流館（東京）

※プロジェクト全体

2009年2月25～27日

FC EXPO 2009

会 場：東京ビッグサイト（東京）

※プロジェクト全体

2009年3月23日

第4回 材料物性グループ会議

会 場：Sping-8 萌光館(兵庫県佐用郡)

※材料物性グループ・金属系グループ

2009年3月26日

Seminar on Hydrogen Storage Materials (HYDRO☆STAR 講演会)

会 場：産業技術総合研究所 つくばセンター（つくば）

※プロジェクト全体

平成 21 年度
水素貯蔵材料先端基盤研究事業 (Hydro☆Star)
活動記録

※=参加グループ名

2009 年 4 月 10 日～12 日

第 4 回 日中水素貯蔵材料セミナー

会 場：(広州)

※プロジェクト全体

2009 年 6 月 2 日

中性子全散乱装置完成披露式典

会 場：つくば量子ビーム研究センター (東海村)

※高エネ研主催 (プロジェクト全体)

2009 年 6 月 2 日

第 2 回 水素貯蔵材料先端基盤研究事業 推進助言委員会

会 場：つくば量子ビーム研究センター (東海村)

※プロジェクト全体

2009 年 6 月 22 日

アルミハイドライド研究者会議

会 場：産業技術総合研究所関西センター (大阪)

※プロジェクト内外の研究関係者

2009 年 6 月 30 日～7 月 3 日

平成 20 年度研究成果報告シンポジウム

会 場：東京国際交流館(お台場)

※プロジェクト全体

2009 年 7 月 3 日

Hydro☆Star 全体会議

会 場：産業技術総合研究所臨海副都心センター (お台場)

※プロジェクト全体

2009 年 7 月 8 日

水素貯蔵材料関連WG (並行事業)

会 場：佐賀大学 (佐賀)

※P L オブザーバ参加

平成 21 年度
水素貯蔵材料先端基盤研究事業 (Hydro☆Star)
活動記録

※=参加グループ名

2009 年 4 月 10 日～12 日

第 4 回 日中水素貯蔵材料セミナー

会 場：(広州)

※プロジェクト全体

2009 年 6 月 2 日

中性子全散乱装置完成披露式典

会 場：つくば量子ビーム研究センター (東海村)

※高エネ研主催 (プロジェクト全体)

2009 年 6 月 2 日

第 2 回 水素貯蔵材料先端基盤研究事業 推進助言委員会

会 場：つくば量子ビーム研究センター (東海村)

※プロジェクト全体

2009 年 6 月 22 日

アルミハイドライド研究者会議

会 場：産業技術総合研究所関西センター (大阪)

※プロジェクト内外の研究関係者

2009 年 6 月 30 日～7 月 3 日

平成 20 年度研究成果報告シンポジウム

会 場：東京国際交流館(お台場)

※プロジェクト全体

2009 年 7 月 3 日

Hydro☆Star 全体会議

会 場：産業技術総合研究所臨海副都心センター (お台場)

※プロジェクト全体

2009 年 7 月 8 日

水素貯蔵材料関連WG (並行事業)

会 場：佐賀大学 (佐賀)

※P L オブザーバ参加

2. 分科会における説明資料

次ページより、プロジェクト推進・実施者が、分科会においてプロジェクトを説明する際に使用した資料を示す。



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.I-(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。

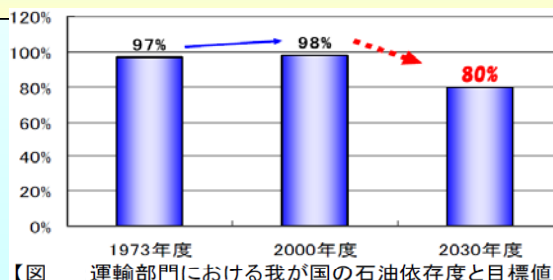
エネルギーイノベーションプログラム

【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す。



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・企業のパ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

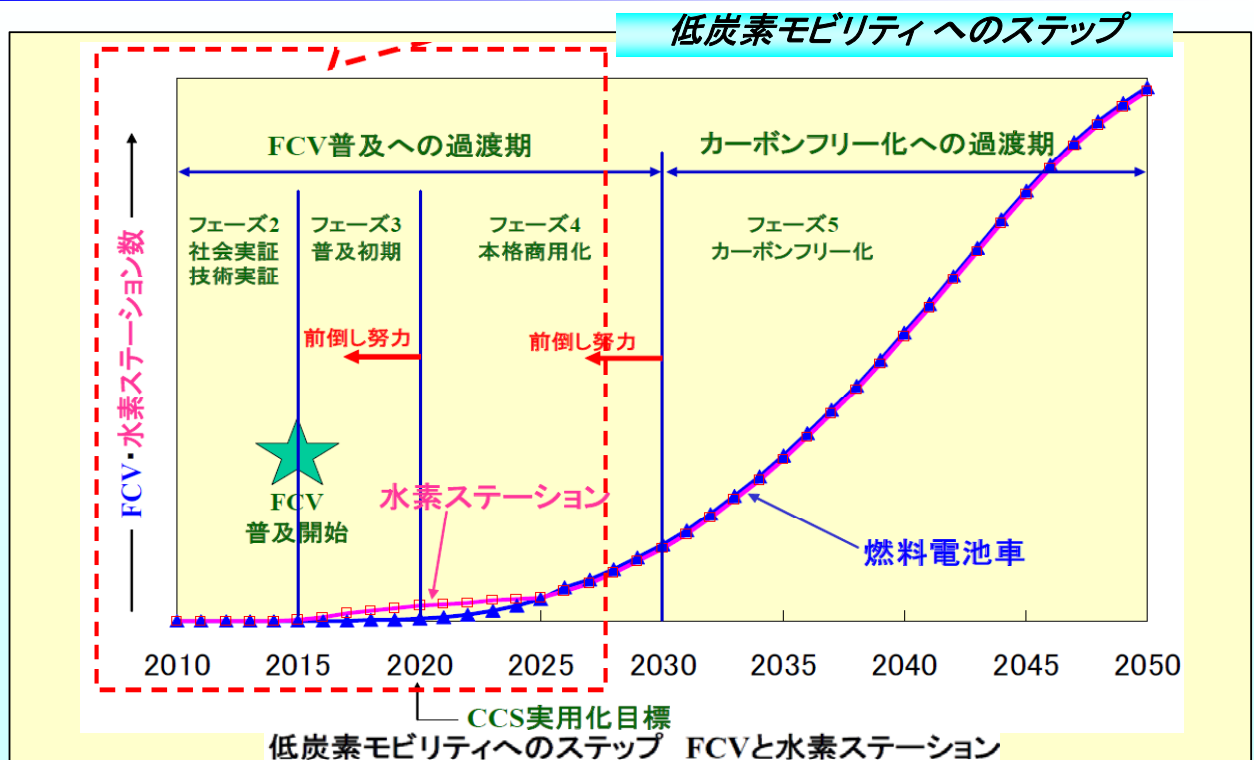
II - v. 電気自動車

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~
33311	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 ポリハイドライド系 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		
33321	有機系・炭素系 水素貯蔵材料	【有機系水素貯蔵材料】 高性能水素放出触媒 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			有機系水素貯蔵材料	炭素系水素貯蔵材料
					【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)	
33331	水素貯蔵容器	水素貯蔵容器コスト (車1台あたり)約300~500万円 水素車載量 5kg		約5~7kg	~数十万円 約7kg	
		圧縮水素容器 高強度材料 液体水素容器 耐久性向上 ハイブリッド(高圧水素貯蔵材料容器) 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)



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

【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)

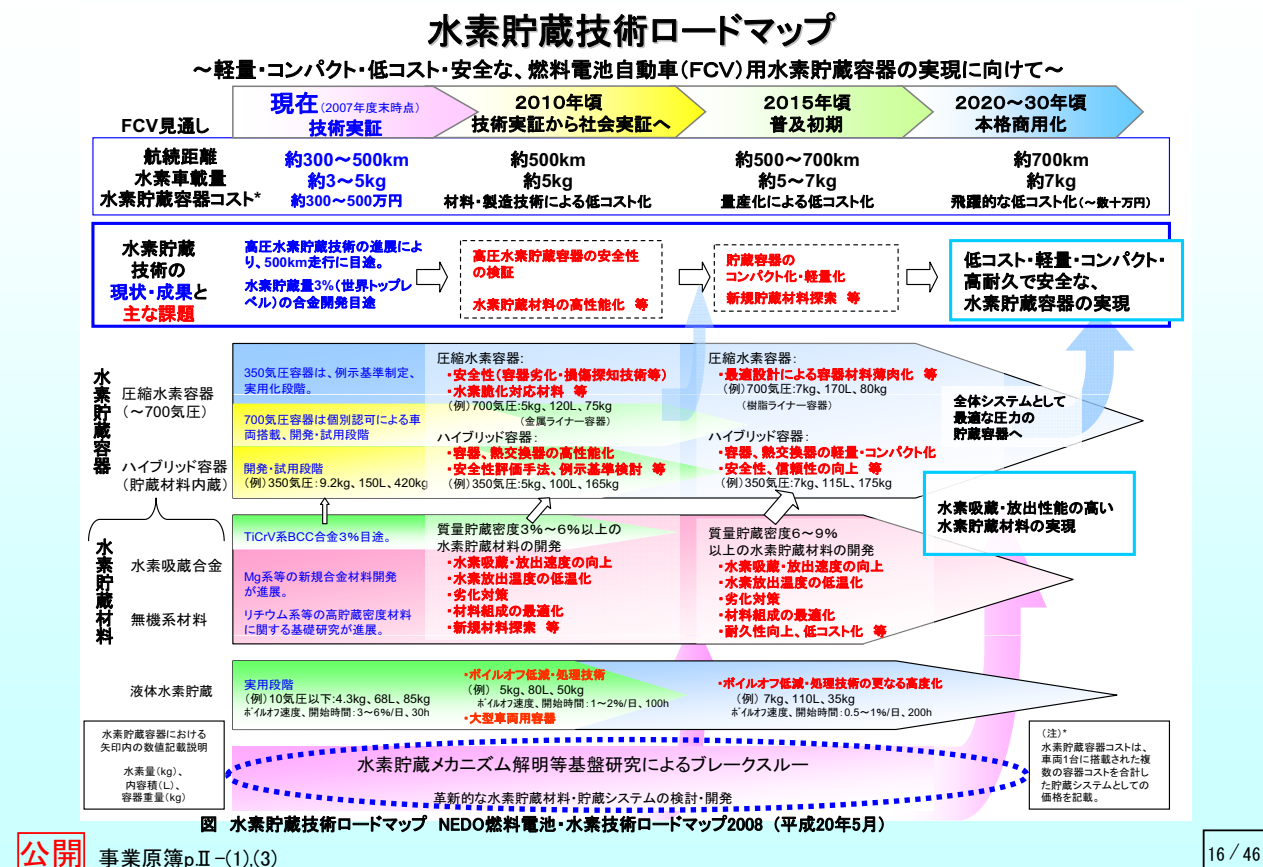
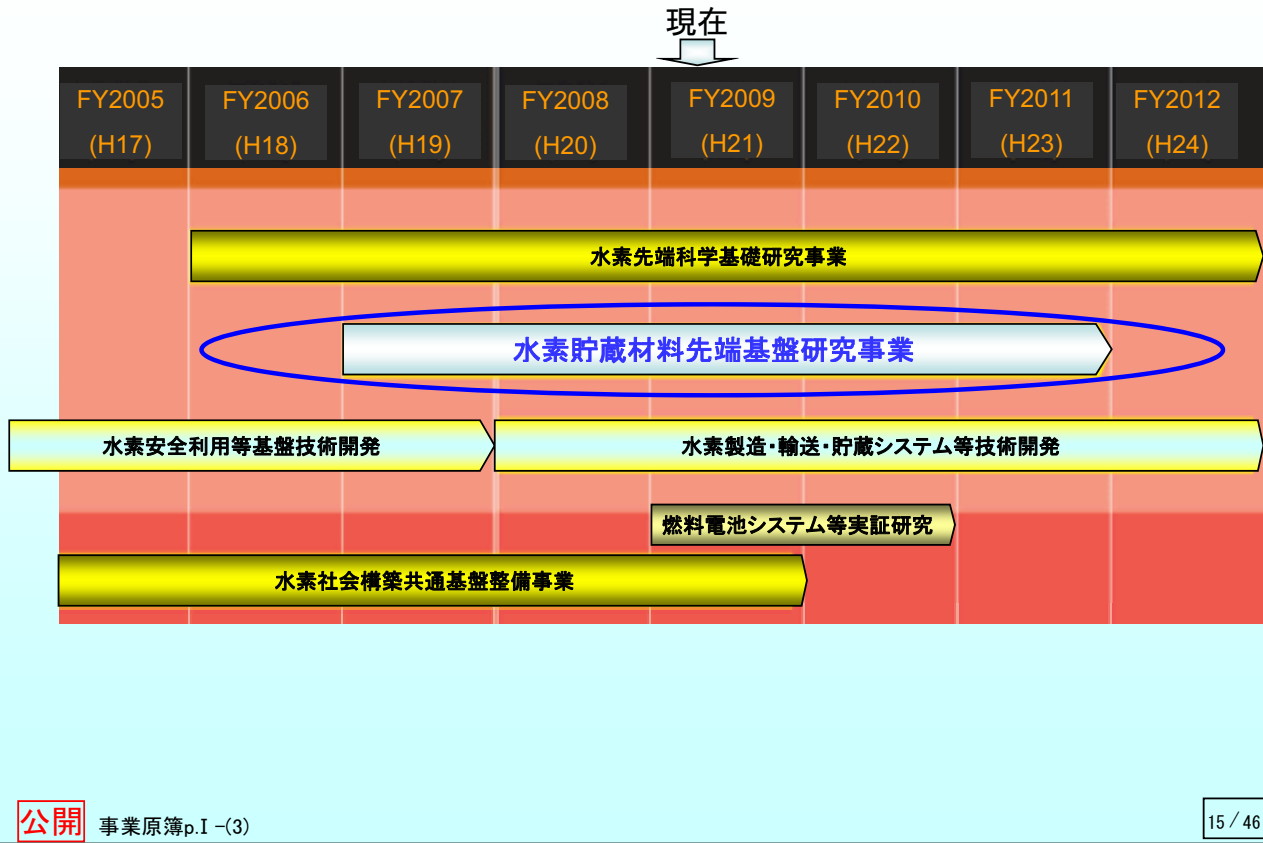
2. 金属系材料の基礎研究 (中村S L)

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)



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

材料科学研究基盤

【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

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

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/パウア一分光
(東海) [JRR-3,J-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/ラザフォード後方散乱
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X線回折/精密構造解析
東北大学
・in-situNMR

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
酸化物質ガス(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
	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】

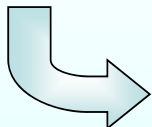
水素分野の学会の専門家、自動車・エネルギー・材料・保安技術など、学界・産業界の有識者の意見・助言をプロジェクトマネジメントに活用

「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/貯蔵機構の原理説明等→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】基盤技術としての中性子散乱法確立	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

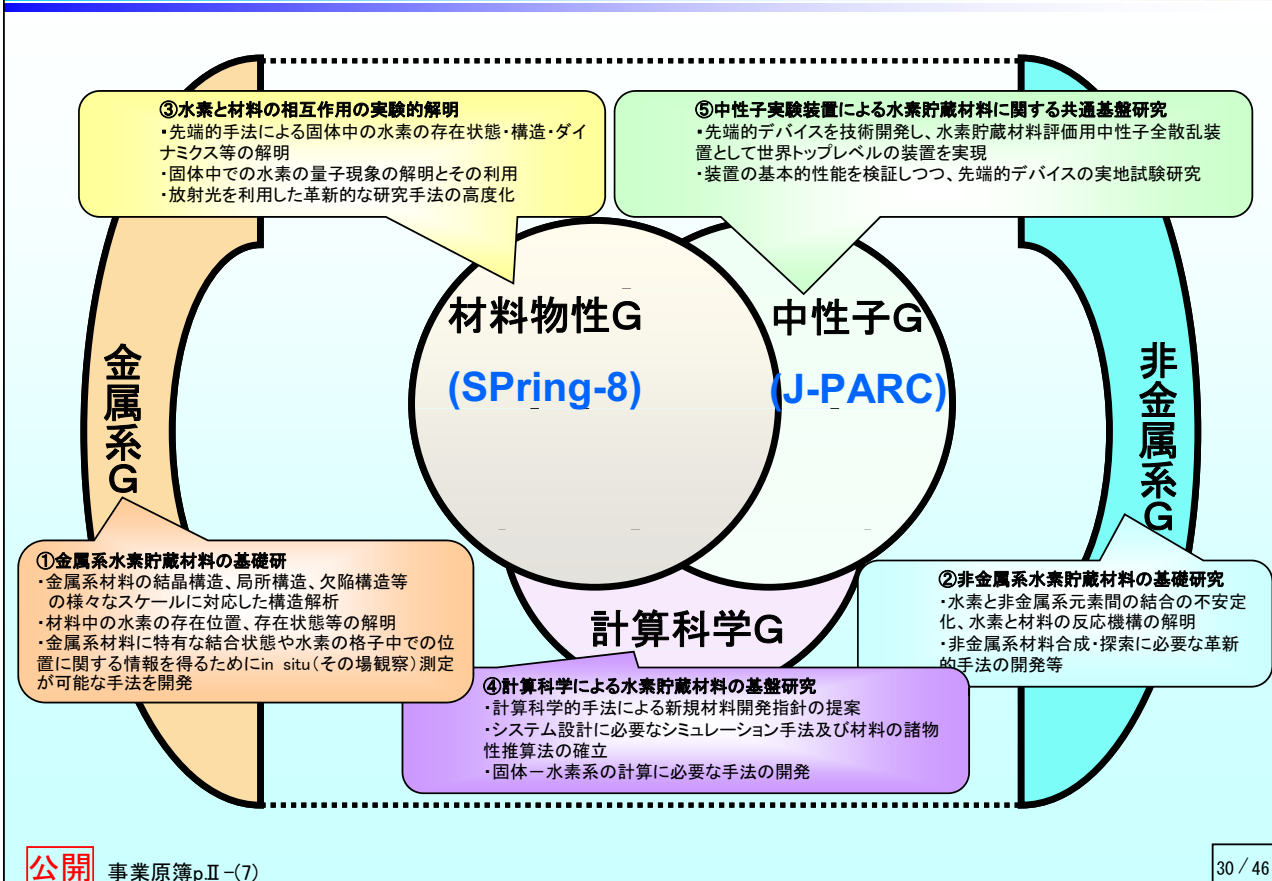
II. 研究開発マネジメント

【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単結晶材料の共同実験 用の研究(担当:原子力機構他)	装置導入・手法開発	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	▽計算科学的評価手法を確立		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】

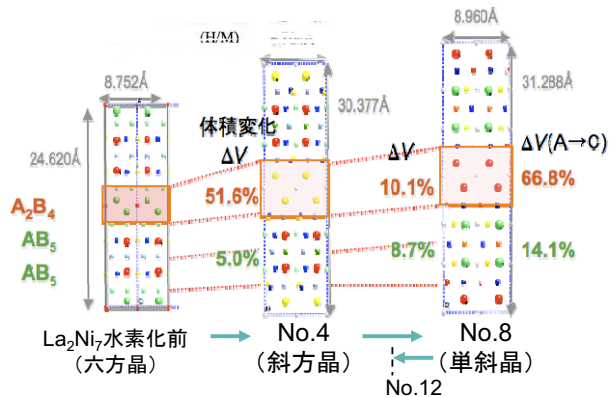
- その場(In-situ)測定法の確立
- ・PCT-XRD同時測定(世界最高)
 - ・In-situ陽電子消滅/NMR(世界初)
- La-Ni系等、構造/吸蔵特性の知見

【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

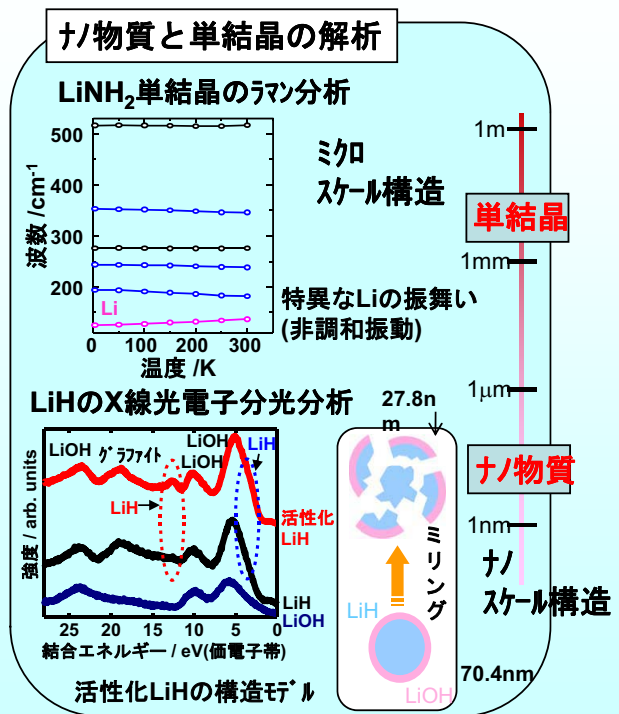
【達成度】 ◎

【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】 ◎

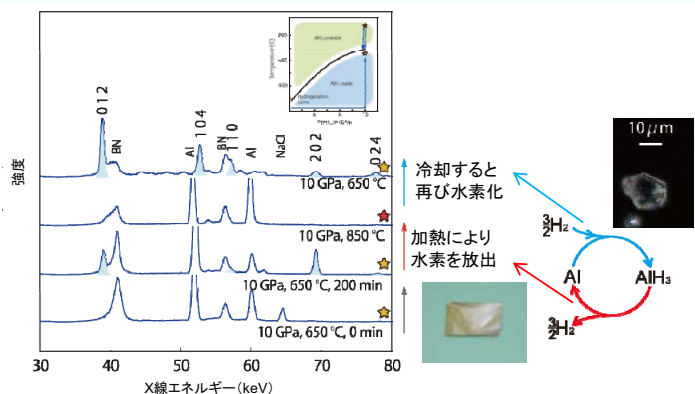
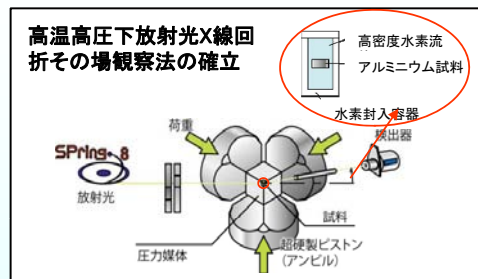
【主要成果】

- ・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】◎

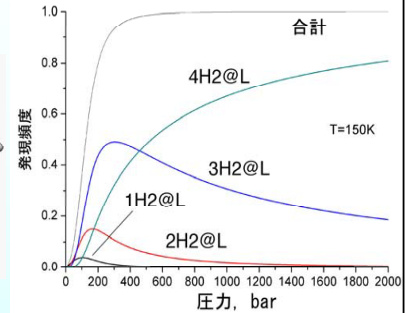
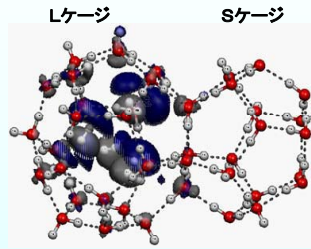
【主要成果】

- ・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

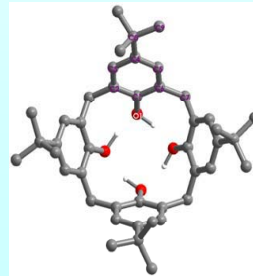
【今後の課題】

- ・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

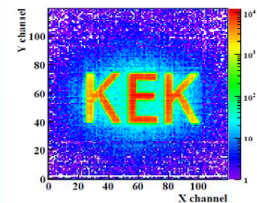
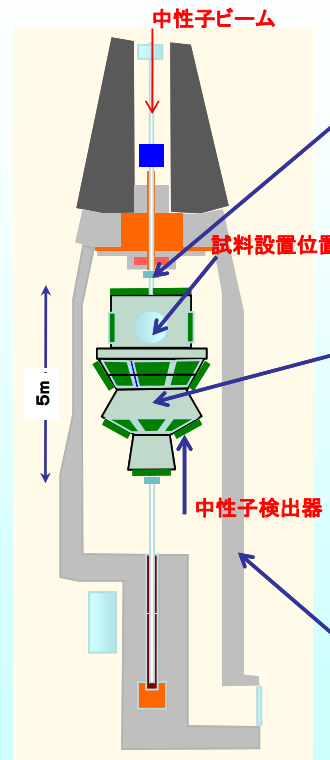
【達成度】○

【主要成果】

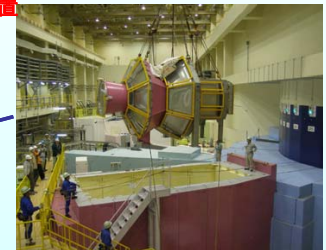
- ・J-PARCにおける中性子全散乱装置(NOVA)を開発・製作し、運用を開始
- ・平成21年度中に中性子制御デバイスの製作まで完了、水素位置情報の精密測定試験を平成22年度初頭開始予定

【今後の課題】

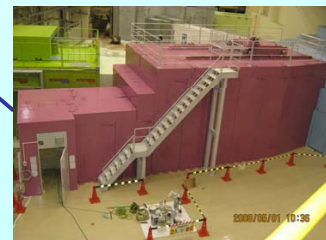
- ・NOVAの性能検証、性能向上(In-situ散乱測定等)
- ・解析ソフトウェアの性能向上
- ・水素貯蔵材料の構造測定と解析



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)

		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。

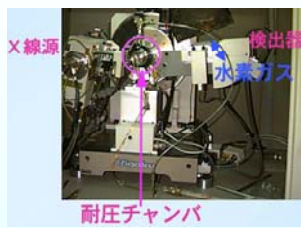
【受賞】

・8件
若手からPLまで成果・功績が高く評価

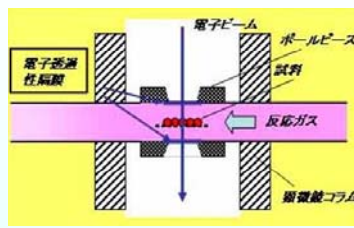
【知財】

・3件

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



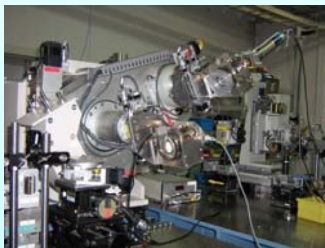
In-situ X線回折(PCT同時測定)



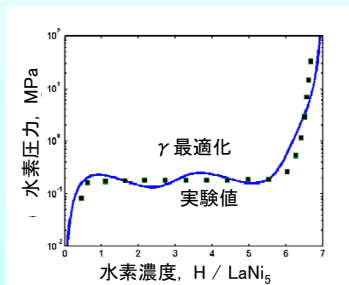
In-situ TEM(水素加圧~150°C)



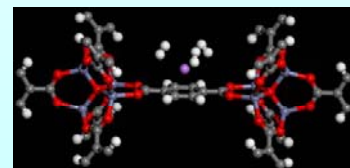
高温高圧X線回折装置 (BL14B1@SPring-8)



放射光メスパウワー分光装置 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术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測

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)

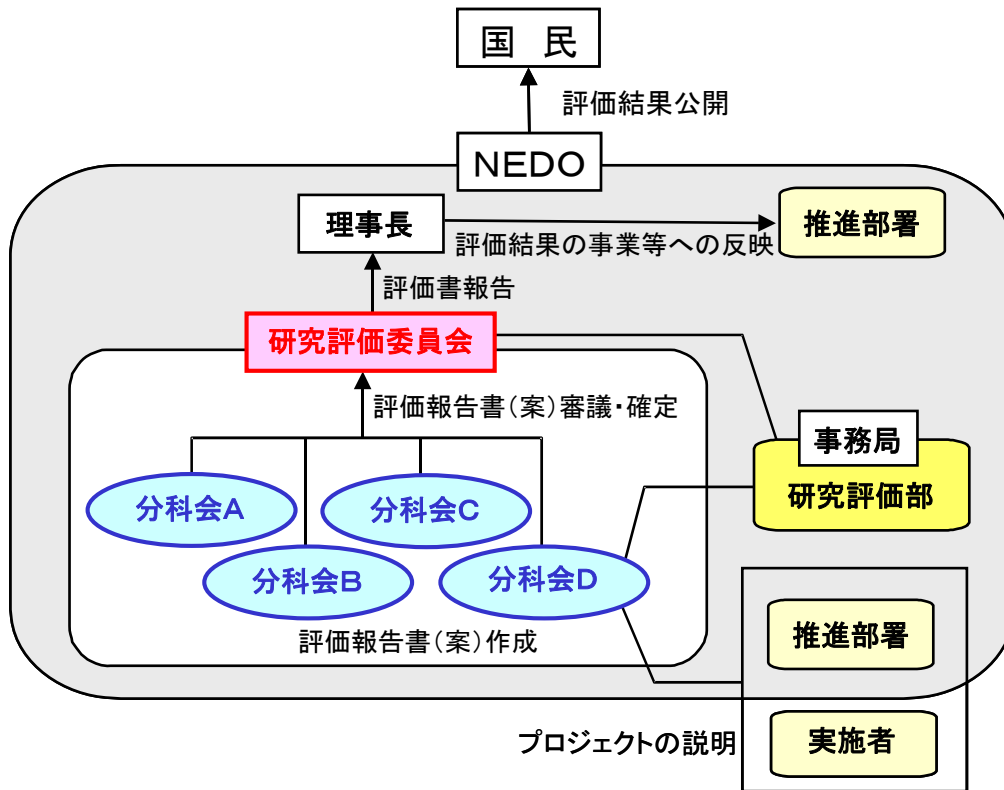
46 / 46

参考資料 1 評価の実施方法

本評価は、「技術評価実施規程」（平成 15 年 10 月制定）に基づいて研究評価を実施する。

独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）における研究評価の手順は、以下のように被評価プロジェクトごとに分科会を設置し、同分科会にて研究評価を行い、評価報告書（案）を策定の上、研究評価委員会において確定している。

- 「NEDO 技術委員・技術委員会等規程」に基づき研究評価委員会を設置
- 研究評価委員会はその下に分科会を設置



1. 評価の目的

評価の目的は「技術評価実施規程」において。

- 業務の高度化等の自己改革を促進する
- 社会に対する説明責任を履行するとともに、
経済・社会ニーズを取り込む
- 評価結果を資源配分に反映させ、資源の重点化及び業務の効率化を
促進する

としている。

本評価においては、この趣旨を踏まえ、本事業の意義、研究開発目標・計画の妥当性、計画を比較した達成度、成果の意義、成果の実用化の可能性等について検討・評価した。

2. 評価者

技術評価実施規程に基づき、事業の目的や態様に即した外部の専門家、有識者からなる委員会方式により評価を行う。分科会委員選定に当たっては以下の事項に配慮して行う。

- 科学技術全般に知見のある専門家、有識者
- 当該研究開発の分野の知見を有する専門家
- 研究開発マネジメントの専門家、経済学、環境問題その他社会的ニーズ
関連の専門家、有識者
- 産業界の専門家、有識者

また、評価に対する中立性確保の観点から事業の推進側関係者を選任対象から除外し、また、事前評価の妥当性を判断するとの側面にかんがみ、事前評価に関与していない者を主体とする。

これらに基づき、分科会委員名簿にある7名を選任した。

なお、本分科会の事務局については、独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構研究評価部が担当した。

3. 評価対象

平成19年度に開始された「水素貯蔵材料先端基盤研究事業」プロジェクトを評価対象とした。

なお、分科会においては、当該事業の推進部署から提出された事業原簿、プロジェクトの内容、成果に関する資料をもって評価した。

4. 評価方法

分科会においては、当該事業の推進部署及び研究実施者からのヒアリングと、それを踏まえた分科会委員による評価コメント作成、評点法による評価及び実施者側等との議論等により評価作業を進めた。

なお、評価の透明性確保の観点から、知的財産保護の上で支障が生じると認められる場合等を除き、原則として分科会は公開とし、研究実施者と意見を交換する形で審議を行うこととした。

5. 評価項目・評価基準

分科会においては、次に掲げる「評価項目・評価基準」で評価を行った。これは、研究評価委員会による『各分科会における評価項目・評価基準は、被評価プロジェクトの性格、中間・事後評価の別等に応じて、各分科会において判断すべきものである。』との考え方に従い、第1回分科会において、事務局が、研究評価委員会により示された「標準的評価項目・評価基準」（参考資料1-7頁参照）をもとに改定案を提示し、承認されたものである。

プロジェクト全体に係わる評価においては、主に事業の目的、計画、運営、達成度、成果の意義や実用化への見通し等について評価した。各個別テーマに係る評価については、主にその目標に対する達成度等について評価した。

評価項目・評価基準

1. 事業の位置付け・必要性について

(1) NEDOの事業としての妥当性

- ・ エネルギーイノベーションプログラムの下で、当該施策・制度の目標達成のために寄与しているか。
- ・ 民間活動のみでは達成できない課題であること、又は公共性が高いことにより、NEDOの関与が必要とされる事業か。
- ・ 当該事業を実施することによりもたらされる効果が、投じた予算との比較において十分であるか。

(2) 事業目的の妥当性

- ・ 内外の技術開発動向、国際競争力の状況、エネルギー需給動向、市場動向、政策動向等から見て、事業の目的は妥当か。

2. 研究開発マネジメントについて

(1) 研究開発目標の妥当性

- ・ 内外の技術動向、市場動向等を踏まえて、戦略的な目標が設定されているか。
- ・ 具体的な開発目標を可能な限り明確に設定しているか。
- ・ 目標達成度を測定・判断するための適切な判定指針が設定されているか。

(2) 研究開発計画の妥当性

- ・ 目標達成のために妥当なスケジュール、予算（各個別研究テーマ毎の配分を含む）となっているか。
- ・ 目標達成に必要な研究要素を取り上げているか。
- ・ 研究開発フローにおける研究要素間の関係、順序は適切か。
- ・ 目標達成のための研究アプローチを、成果最大化の観点から吟味し、選定した上で展開が図られているか。

(3) 研究開発実施者の事業体制の妥当性

- ・ 適切な研究開発チーム構成での実施体制になっているか。
- ・ 高度な研究遂行能力を有する研究機関を実施者として選定しているか。

- ・ 全体を統括するプロジェクトリーダー等が選任され、十分に活躍できる環境が整備されているか
- ・ 目標達成及び効率的実施のために必要な実施者間の連携が十分に行われる体制となっているか。
- ・ 水素貯蔵材料の実用化シナリオに基づき、成果の受け取り手（ユーザー、活用・実用化の想定者等）に対して、関与を求める体制を整えているか。

(4)情勢変化への対応等

- ・ 進捗状況を常に把握し、社会・経済の情勢の変化及び政策・技術動向に機敏かつ適切に対応しているか。
- ・ 計画見直しの方針は一貫しているか（中途半端な計画見直しが研究方針の揺らぎとなっていないか）。計画見直しを適切に実施しているか。

3. 研究開発成果について

(1)中間目標の達成度

- ・ 成果は目標をクリアしているか。
- ・ 全体としての目標達成はどの程度か。
- ・ 目標未達成の場合、目標達成までの課題を把握し、課題解決の方針が明確になっているか。

(2)成果の意義

- ・ 成果は市場の拡大或いは市場の創造につながる事が期待できるか。
- ・ 成果は、世界初あるいは世界最高水準か。
- ・ 成果は、新たな技術領域を開拓することが期待できるか。
- ・ 成果は汎用性があるか。
- ・ 投入された予算に見合った成果が得られているか。
- ・ 成果は、他の競合技術と比較して優位性があるか。

(3)知的財産権等の取得及び標準化の取組

- ・ 知的財産権等の取扱（特許や意匠登録出願、著作権や回路配置利用権の登録、品種登録出願、営業機密の管理等）は事業戦略に沿って国内外に適切に行われているか。

(4)成果の普及

- ・ 論文の発表は、研究内容を踏まえ適切に行われているか。

- ・ 成果の受取手（ユーザー、活用・実用化の想定者等）に対して、適切に成果を普及しているか。また、普及の見通しは立っているか。
- ・ 一般に向けて広く情報発信をしているか。

(5)成果の最終目標の達成可能性

- ・ 最終目標を達成できる見込みか。
- ・ 最終目標に向け、課題とその解決の道筋が明確に示され、かつ妥当なものか。

4. 実用化の見通しについて

(1)成果の実用化可能性

- ・ 産業界における水素貯蔵材料の実用化に向けた出口イメージが明確になっているか。
- ・ 産業界における水素貯蔵材料の実用化に向けた出口イメージに基づき、開発の各段階でマイルストーンを明確にしているか。それを踏まえ、引き続き研究開発が行われる見通しは立っているか。

(2)波及効果

- ・ 成果は関連分野への波及効果（技術的・経済的・社会的）を期待できるものか。
- ・ プロジェクトの実施自体が当該分野の研究開発や人材育成等を促進するなどの波及効果を生じているか。

標準的評価項目・評価基準（中間評価）

2008. 3. 27

【中間評価 標準的評価項目・評価基準の位置付け（基本的考え方）】

標準的評価項目・評価基準は、第17回研究評価委員会（平成20年3月27日付）において以下のとおり定められている。（本文中の記載例による1・・・、2・・・、3・・・、4・・・が標準的評価項目、それぞれの項目中の(1)・・・、(2)・・・が標準的評価基準、それぞれの基準中の・・・が視点）

ただし、これらの標準的評価項目・評価基準は、研究開発プロジェクトの中間評価における標準的な評価の視点であり、各分科会における評価項目・評価基準は、被評価プロジェクトの性格等に応じて、各分科会において判断すべきものである。

1. 事業の位置付け・必要性について

(1) NEDOの事業としての妥当性

- ・ 特定の施策（プログラム）、制度の下で実施する事業の場合、当該施策・制度の目標達成のために寄与しているか。
- ・ 民間活動のみでは改善できないものであること、又は公共性が高いことにより、NEDOの関与が必要とされる事業か。
- ・ 当該事業を実施することによりもたらされる効果が、投じた予算との比較において十分であるか。

(2) 事業目的の妥当性

- ・ 内外の技術開発動向、国際競争力の状況、エネルギー需給動向、市場動向、政策動向、国際貢献の可能性等から見て、事業の目的は妥当か。

2. 研究開発マネジメントについて

(1) 研究開発目標の妥当性

- ・ 内外の技術動向、市場動向等を踏まえて、戦略的な目標が設定されているか。
- ・ 具体的かつ明確な開発目標を可能な限り定量的に設定しているか。
- ・ 目標達成度を測定・判断するための適切な指標が設定されているか。

(2)研究開発計画の妥当性

- ・ 目標達成のために妥当なスケジュール、予算（各個別研究テーマ毎の配分を含む）となっているか。
- ・ 目標達成に必要な要素技術を取り上げているか。
- ・ 研究開発フローにおける要素技術間の関係、順序は適切か。
- ・ 継続プロジェクトや長期プロジェクトの場合、技術蓄積を、実用化の観点から絞り込んだうえで活用が図られているか。

(3)研究開発実施の事業体制の妥当性

- ・ 適切な研究開発チーム構成での実施体制になっているか。
- ・ 真に技術力と事業化能力を有する企業を実施者として選定しているか。
- ・ 研究管理法人を経由する場合、研究管理法人が真に必要な役割を担っているか。
- ・ 全体を統括するプロジェクトリーダー等が選任され、十分に活躍できる環境が整備されているか。
- ・ 目標達成及び効率的実施のために必要な実施者間の連携 and/or 競争が十分に行われる体制となっているか。
- ・ 実用化シナリオに基づき、成果の受け取り手（ユーザー、活用・実用化の想定者等）に対して、関与を求める体制を整えているか。

(4)情勢変化への対応等

- ・ 進捗状況を常に把握し、社会・経済の情勢の変化及び政策・技術動向に機敏かつ適切に対応しているか。
- ・ 計画見直しの方針は一貫しているか（中途半端な計画見直しが研究方針の揺らぎとなっていないか）。計画見直しを適切に実施しているか。

3. 研究開発成果について

(1)中間目標の達成度

- ・ 成果は目標値をクリアしているか。
- ・ 全体としての目標達成はどの程度か。
- ・ 目標未達成の場合、目標達成までの課題を把握し、課題解決の方針が明確になっているか。

(2)成果の意義

- ・ 成果は市場の拡大或いは市場の創造につながる事が期待できるか。

- ・ 成果は、世界初あるいは世界最高水準か。
- ・ 成果は、新たな技術領域を開拓することが期待できるか。
- ・ 成果は汎用性があるか。
- ・ 投入された予算に見合った成果が得られているか。
- ・ 成果は、他の競合技術と比較して優位性があるか。

(3)知的財産権等の取得及び標準化の取組

- ・ 知的財産権等の取扱（特許や意匠登録出願、著作権や回路配置利用権の登録、品種登録出願、営業機密の管理等）は事業戦略、または実用化計画に沿って国内外に適切に行われているか。
- ・ 国際標準化に関する事項が計画されている場合、得られた研究開発の成果に基づく国際標準化に向けた提案等の取組が適切に行われているか。

(4)成果の普及

- ・ 論文の発表は、研究内容を踏まえ適切に行われているか。
- ・ 成果の受取手（ユーザー、活用・実用化の想定者等）に対して、適切に成果を普及しているか。また、普及の見通しは立っているか。
- ・ 一般に向けて広く情報発信をしているか。

(5)成果の最終目標の達成可能性

- ・ 最終目標を達成できる見込みか。
- ・ 最終目標に向け、課題とその解決の道筋が明確に示され、かつ妥当なものか。

4. 実用化、事業化の見通しについて

(1)成果の実用化可能性

- ・ 産業技術としての見極め（適用可能性の明確化）ができているか。
- ・ 実用化に向けて課題が明確になっているか。課題解決の方針が明確になっているか。
- ・ 国際標準化に関する事項が計画されている場合、国際規格化等、標準整備に向けた見通しが得られているか。

(2)事業化までのシナリオ

- ・ コストダウン、競合技術との比較、導入普及、事業化までの期間、事業化とそれに伴う経済効果等の見通しは立っているか。

(3)波及効果

- ・ 成果は関連分野への波及効果（技術的・経済的・社会的）を期待できるものか。
- ・ プロジェクトの実施自体が当該分野の研究開発や人材育成等を促進するなどの波及効果を生じているか。

※基礎的・基盤的研究及び知的基盤・標準整備等の研究開発の場合は、以下の項目・基準による。

*基礎的・基盤的研究開発の場合

3. 研究開発成果について

(1)中間目標の達成度

- ・ 成果は目標値をクリアしているか。
- ・ 全体としての目標達成はどの程度か。
- ・ 目標未達成の場合、目標達成までの課題を把握し、課題解決の方針が明確になっているか。

(2)成果の意義

- ・ 成果は市場の拡大或いは市場の創造につながることを期待できるか。
- ・ 成果は、世界初あるいは世界最高水準か。
- ・ 成果は、新たな技術領域を開拓することが期待できるか。
- ・ 成果は汎用性があるか。
- ・ 投入された予算に見合った成果が得られているか。
- ・ 成果は、他の競合技術と比較して優位性があるか。

(3)知的財産権等の取得及び標準化の取組

- ・ 知的財産権等の取扱（特許や意匠登録出願、著作権や回路配置利用権の登録、品種登録出願、営業機密の管理等）は事業戦略、または実用化計画に沿って国内外に適切に行われているか。
- ・ 国際標準化に関する事項が計画されている場合、得られた研究開発の成果に基づく国際標準化に向けた提案等の取組が適切に行われているか。

(4)成果の普及

- ・ 論文の発表は、研究内容を踏まえ適切に行われているか。
- ・ 成果の受取手（ユーザー、活用・実用化の想定者等）に対して、適切に成果を普及しているか。また、普及の見通しは立っているか。
- ・ 一般に向けて広く情報発信をしているか。

(5)成果の最終目標の達成可能性

- ・ 最終目標を達成できる見込みか。
- ・ 最終目標に向け、課題とその解決の道筋が明確に示され、かつ妥当なものか。

4. 実用化の見通しについて

(1)成果の実用化可能性

- ・ 実用化イメージ・出口イメージが明確になっているか。
- ・ 実用化イメージ・出口イメージに基づき、開発の各段階でマイルストーンを明確にしているか。それを踏まえ、引き続き研究開発が行われる見通しは立っているか。
- ・ 国際標準化に関する事項が計画されている場合、国際規格化等、標準整備に向けた見通しが得られているか。

(2)波及効果

- ・ 成果は関連分野への波及効果（技術的・経済的・社会的）を期待できるものか。
- ・ プロジェクトの実施自体が当該分野の研究開発や人材育成等を促進するなどの波及効果を生じているか。

* 知的基盤・標準整備等の研究開発の場合

3. 研究開発成果について

(1)中間目標の達成度

- ・ 成果は目標値をクリアしているか。
- ・ 全体としての目標達成はどの程度か。
- ・ 目標未達成の場合、目標達成までの課題を把握し、課題解決の方針が明確になっているか。

(2)成果の意義

- ・ 成果は市場の拡大或いは市場の創造につながることを期待できるか。
- ・ 成果は、世界初あるいは世界最高水準か。
- ・ 成果は、新たな技術領域を開拓することが期待できるか。
- ・ 成果は汎用性があるか。
- ・ 投入された予算に見合った成果が得られているか。
- ・ 成果は公開性が確保されているか。

(3)知的財産権等の取得及び標準化の取組

- ・ 研究内容に新規性がある場合、知的財産権等の取扱（特許や意匠登録出願、著作権や回路配置利用権の登録、品種登録出願、営業機密の管理等）は事業戦略、または実用化計画に沿って国内外に適切に行われているか。

- ・ 国際標準化に関する事項が計画されている場合、得られた研究開発の成果に基づく国際標準化に向けた提案等の取組が適切に行われているか。

(4)成果の普及

- ・ 論文の発表は、研究内容を踏まえ適切に行われているか。
- ・ 成果の受取手（ユーザー、活用・実用化の想定者等）に対して、適切に成果を普及しているか。また、普及の見通しは立っているか。
- ・ 一般に向けて広く情報発信をしているか。

(5)成果の最終目標の達成可能性

- ・ 最終目標を達成できる見込みか。
- ・ 最終目標に向け、課題とその解決の道筋が明確に示され、かつ妥当なものか。

4. 実用化の見通しについて

(1)成果の実用化可能性

- ・ 整備した知的基盤についての利用は実際にあるか、その見通しが得られているか。
- ・ 公共財として知的基盤を供給、維持するための体制は整備されているか、その見込みはあるか。
- ・ 国際標準化に関する事項が計画されている場合、国際規格化等、標準整備に向けた見通しが得られているか。
- ・ J I S化、標準整備に向けた見通しが得られているか。注) 国内標準に限る
- ・ 一般向け広報は積極的になされているか。

(2)波及効果

- ・ 成果は関連分野への波及効果（技術的・経済的・社会的）を期待できるものか。
- ・ プロジェクトの実施自体が当該分野の研究開発や人材育成等を促進するなどの波及効果を生じているか。

本研究評価委員会報告は、独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO 技術開発機構）研究評価部が委員会の事務局として編集しています。

平成21年10月

NEDO 技術開発機構

研究評価部

統括主幹 竹下 満

主幹 寺門 守

担当 室井 和幸

* 研究評価委員会に関する情報は NEDO 技術開発機構のホームページに掲載しています。

(<http://www.nedo.go.jp/iinkai/kenkyuu/index.html>)

〒212-8554 神奈川県川崎市幸区大宮町1310番地

ミュージア川崎セントラルタワー20F

TEL 044-520-5161 FAX 044-520-5162