

2012年7月30日(公開)

# 水素貯蔵材料先端基盤研究事業

プロジェクトリーダー

秋葉 悦男

産業技術総合研究所客員研究員

九州大学工学研究院教授

【公開】

1

## 内容

1. 本事業の背景・研究開発の目的
2. 本事業の運営体制・取り巻く状況の変化
3. 産業界等との連携の構築
4. 成果紹介
  - 4-1 高性能水素貯蔵材料に関する指針
    - ① 既存材料の高性能化
    - ② 新規材料の提案
  - 4-2 超先端的評価手法の開発
5. まとめ

【公開】

2

## 本事業の背景

- 水素エネルギー
- 様々なエネルギーから造られる二次エネルギー
- 電力と相互変換可能な唯一の燃料
- 燃焼して水(水蒸気)しか生成しない最もクリーンな燃料
- 燃料電池の燃料として大いに期待

ガソリンのような既存の液体燃料と比較して希薄な水素を高  
密度に効率よく、安全に貯蔵輸送する技術確立が必要

「水素貯蔵材料」は「高密度貯蔵」実現の有力な候補



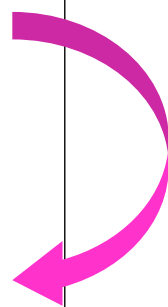
高性能化には基礎基盤に立返ったチャレンジが不可欠

【公開】

3

## 水素の体積エネルギー密度

気体 H <sub>2</sub> :	12 MJ/m <sup>3</sup>
天然ガス:	39 MJ/m <sup>3</sup>
液体 H <sub>2</sub> :	10,070 MJ/m <sup>3</sup>
ガソリン:	34,600 MJ/m <sup>3</sup>



ガソリンのような既存の液体燃料と比較して希薄な水素を高  
密度に効率よく、安全に貯蔵輸送することが必要不可欠



技術的チャレンジ

# 本事業が何故必要か？

## 水素貯蔵材料は

- ・1960年代後半に提案
- ・1970年に室温で利用可能な材料の報告
- ・1990年からニッケル水素電池として生産開始



商品化を急ぐあまり、基礎基盤研究がおろそかに  
更なるブレークスルーには、基礎基盤に立ち返る必要

# 研究の目的と内容

## 水素エネルギー社会実現のため

- ・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
- ・材料の応用技術に必要な基盤研究
- ・幅広い分野で横断的な取り組み
- ・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

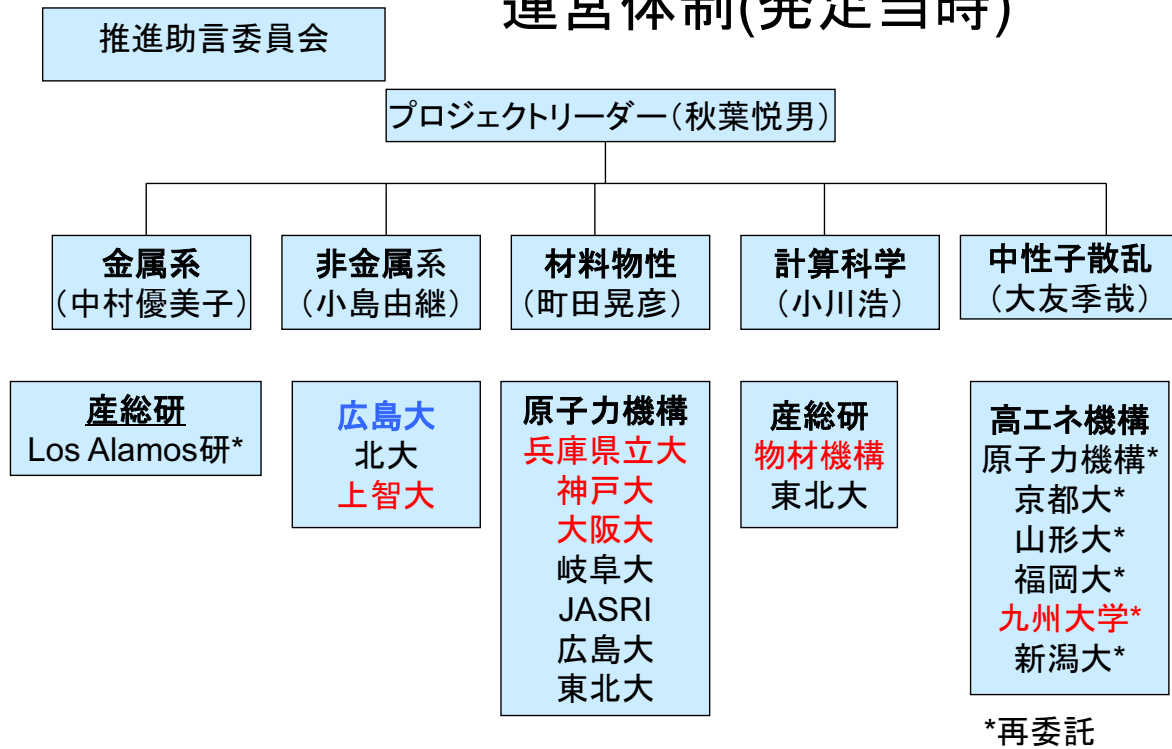
## 材料と水素の相互作用・構造等の解明のため

- ・大規模量子ビーム施設SPring-8及びJ-PARCを活用
- ・計算科学の材料研究への応用

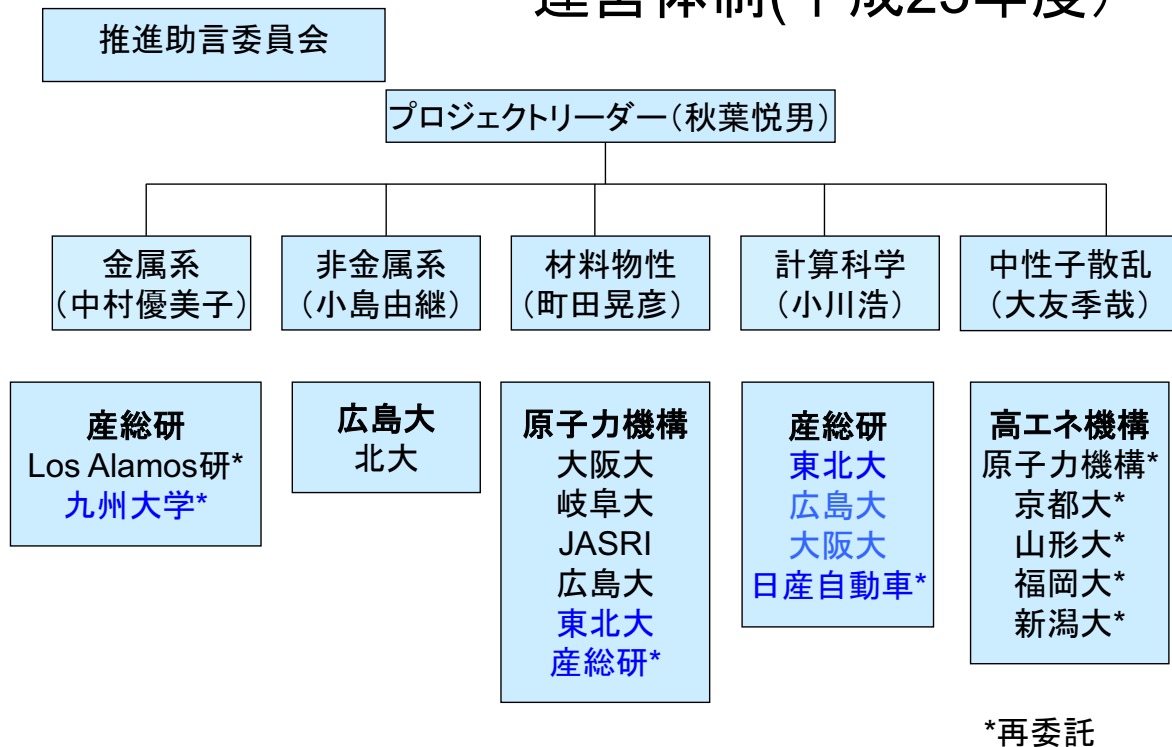
研究期間 平成19年度より5年間(3年目に中間評価)

予算額 総額 46億円

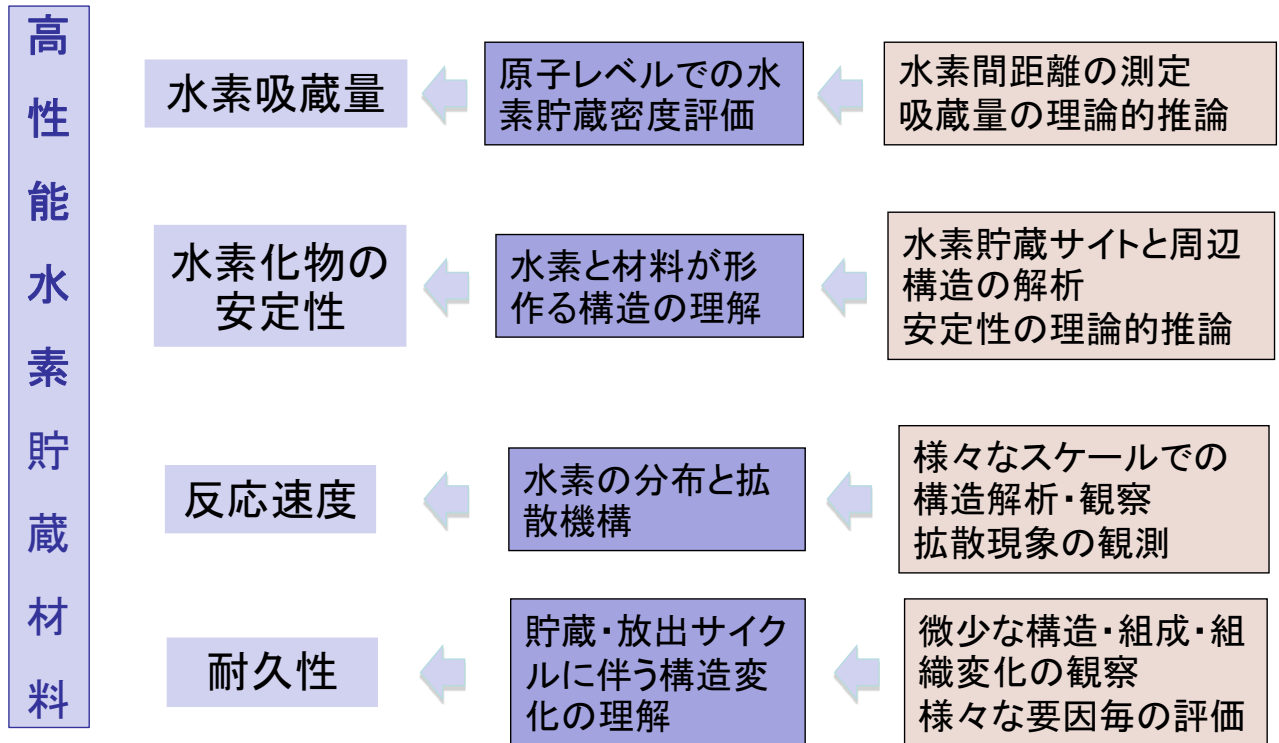
## 運営体制(発足当時)



## 運営体制(平成23年度)



# 本事業における最終目標へのアプローチ



【公開】事業原簿p. II-(47)~(48)

# 燃料電池自動車とインフラに関する動向

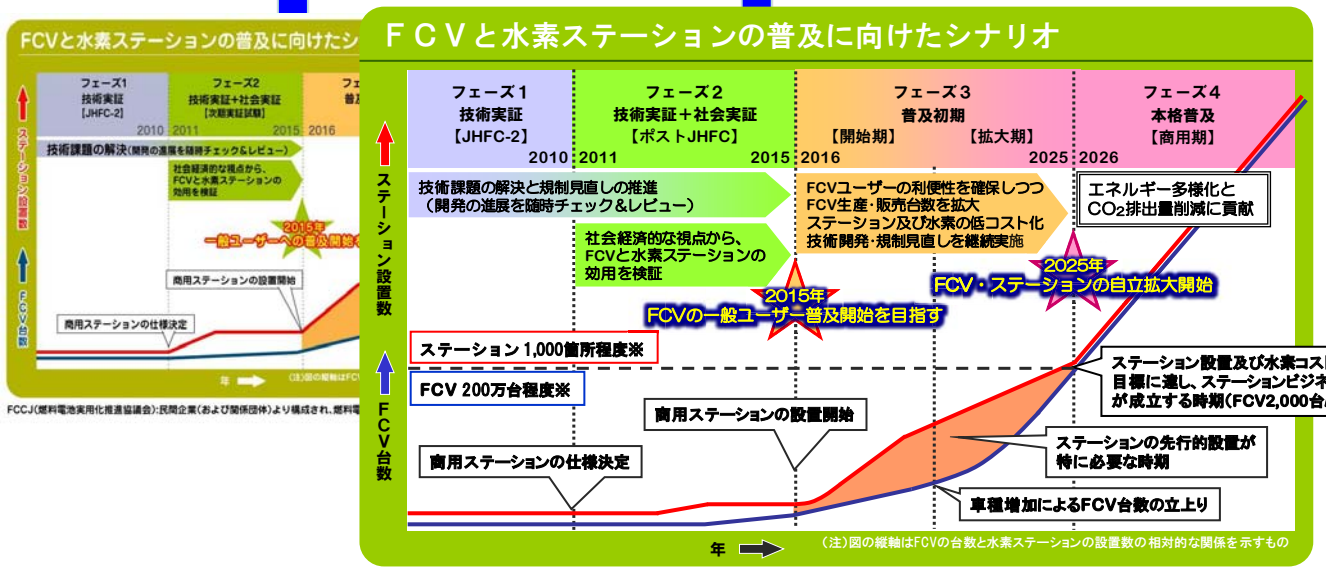
2007年度 2008年度 2009年度 2010年度 2011年度

発足

中間評価

13社による声明

事業終了



※前提条件:FCVユーザーのメリット(価格・利便性等)が確保されて、順調に普及が進んだ場合

【公開】事業原簿p. I-(9)~(11)

# 連携の構築

本事業では成果普及および研究の進捗に研究開発における連携が不可欠

本事業における連携は以下の四点を重視

1. 事業内での連携
2. 水素貯蔵材料を対象としているNEDO他事業との連携
3. 産業界との連携
4. 国際的な連携

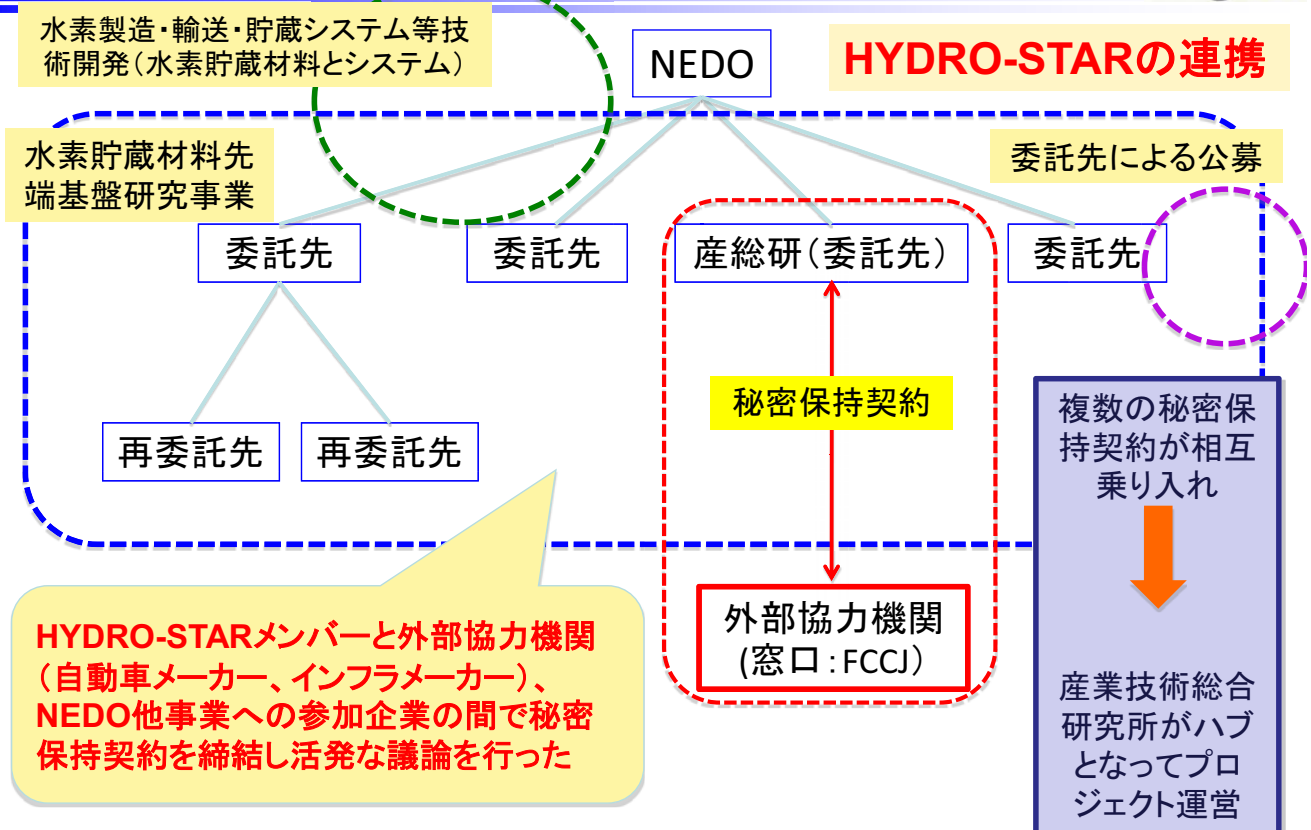
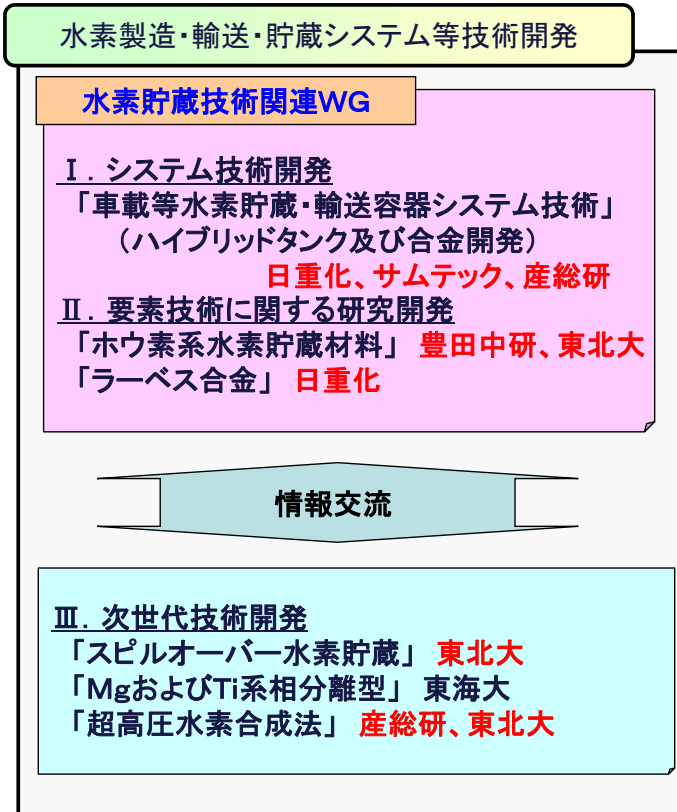
【公開】事業原簿p. II-(38)~(44)

II. 研究開発マネジメントについて 2. 事業計画内容  
**水素貯蔵材料先端基盤研究事業 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		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		非金属系の開発指針
③水素貯蔵材料の応用の研究(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			高濃度水素化合物等の開発指針
④計算科学的手法に基づく水素吸蔵材料の特性評価とメカニズム解明に関する研究(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			▽中性子散乱装置の立上		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			▽中性子散乱法の確立		☆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

【公開】事業原簿p. II-(6)

# NEDO他事業との連携



## 外部との連携：委託先としての公募を可能に

### 「委託先からの公募」案件（2009年） **二件の共同研究を推進**

実験・解析技術の内容

#### (1) 金属系材料グループ ← **豊田中央研究所**

- 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
- 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
- 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

#### (2) 非金属系材料グループ

- ① 水素貯蔵材料の水素吸蔵／放出時のその場光学顕微鏡観察  
広島大学 先進機能物質研究センター
- 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

#### (3) 材料物性グループ ← **東北大学金属材料研究所**

- 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

#### (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

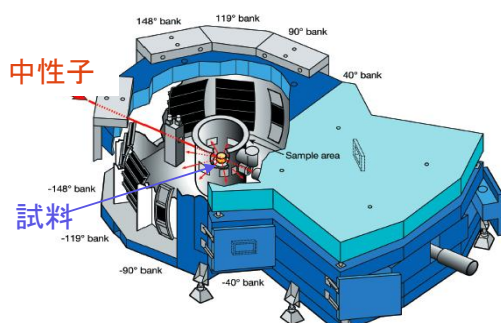
#### (5) 中性子グループ J-PARCの公募システムによる公募を検討中： 高エネルギー加速器研究機構

【公開】事業原簿p. II-(43)~(44)

15

## 国際共同研究

- ・ 1. 経済産業省とロスアラモス研究所は、2006年9月12日（火）にエネルギー分野における研究開発に関し、密接に情報交換を行うとともに、双方で合意したプロジェクトについて、研究開発協力を行うことに同意した。
- ・ 2. 2007年度より「**水素貯蔵材料先端基盤研究**」を共同で推進。このため、双方は、秋葉悦男・産業技術総合研究所主幹研究員及び William Tumasロスアラモス国立研究所・水素燃料電池研究所長を責任者として指名した。
- ・ **2007年度から事業終了まで5年間、産総研からの再委託事業としてロスアラモス国立研究所と共同研究を推進。**



ロスアラモス国立研の  
中性子装置NPDF



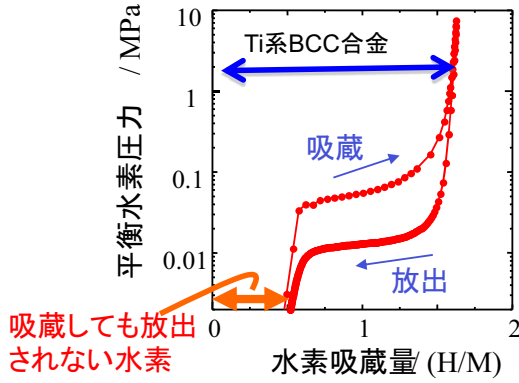
LANL-AIST-NEDOワークショップ開催

【公開】事業原簿p. II-(38)~(39)

16

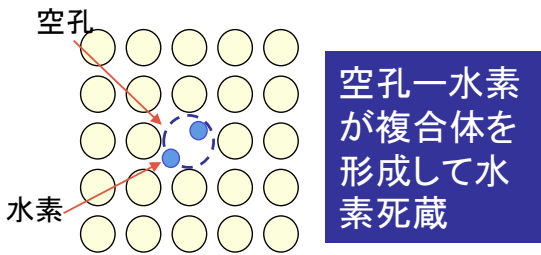


## 高性能水素貯蔵材料指針：既存材料の性能向上

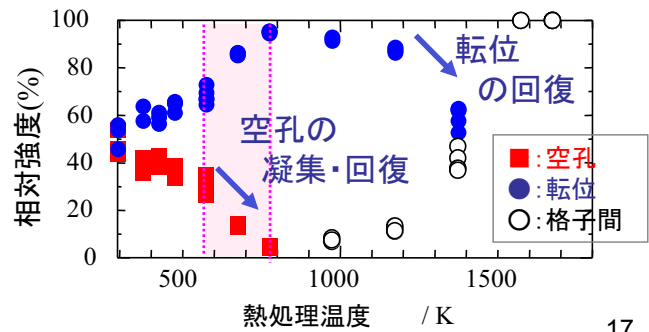


死蔵水素が無ければ**4wt%**の吸蔵量実現可能  
 死蔵水素は水素吸蔵と共にできた空孔と反応  
 空孔生成を制御することは困難な事が判明  
 水素放出と共に空孔が無くなり、死蔵水素が存在しない水素貯蔵材料を発見(既存材料の成分制御で可能に)

**指針：**  
 死蔵水素の原因解明と材料開発から  
 死蔵水素の無い水素貯蔵材料の実現

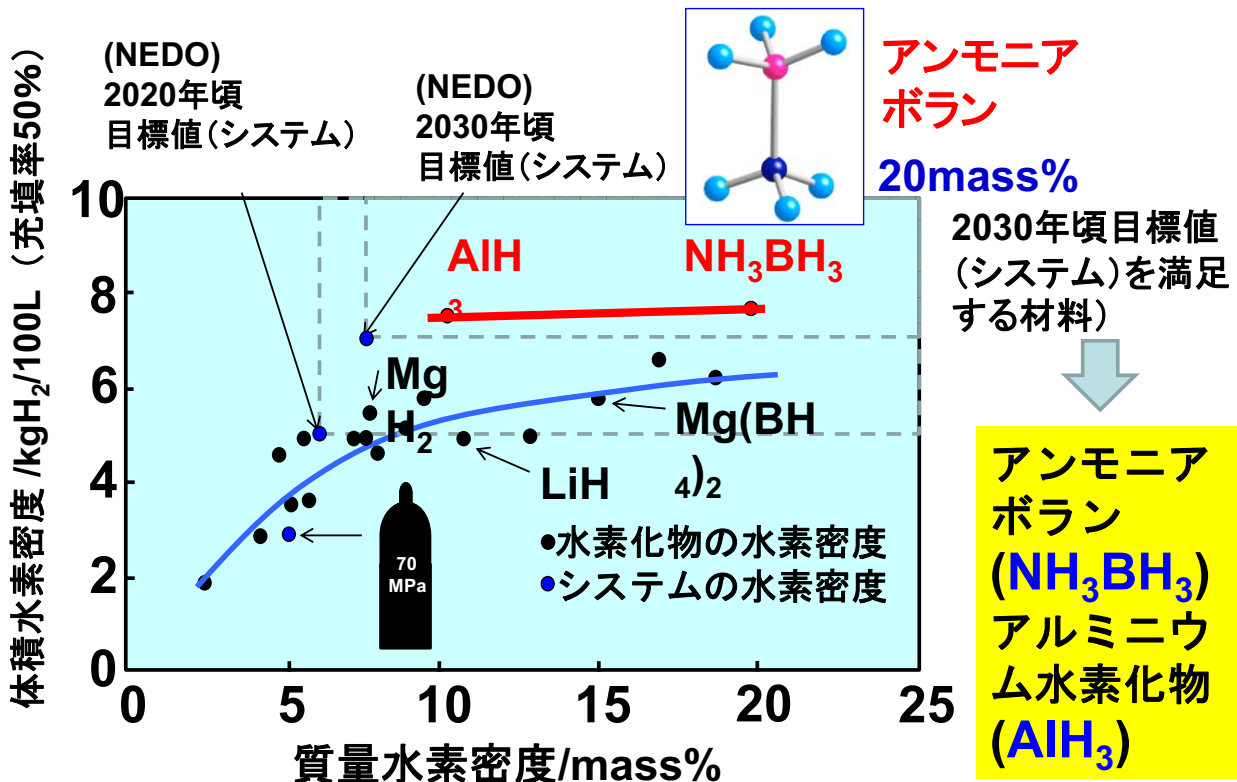


空孔の量を減らすことにより、死蔵水素を減少させ、有効水素量を増加できる



【公開】事業原簿p. Ⅲ2.1-(30)~(31)

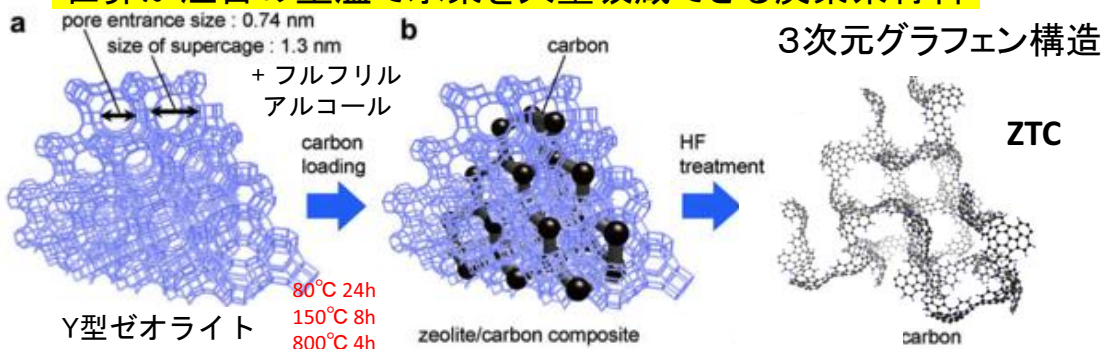
## 高性能水素貯蔵材料指針：高性能材料の提案



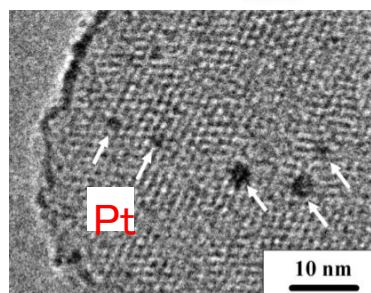
【公開】事業原簿p. Ⅲ2.2-(4)

# 先端炭素材料による水素貯蔵：実験と計算の融合

**ZTC = Zeolite-Templated Carbon (ゼオライト鋳型炭素)**  
**世界が注目の室温で水素を大量吸蔵できる炭素系材料**



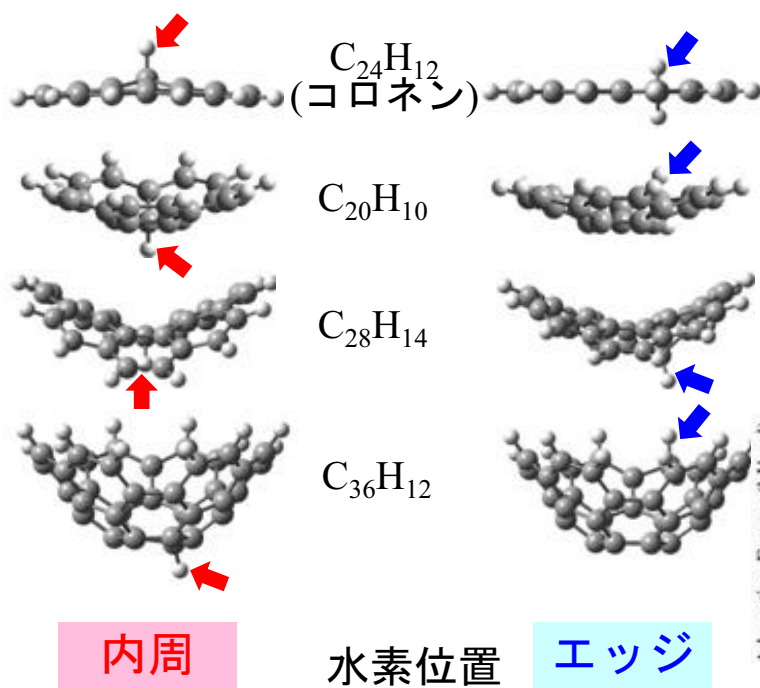
比表面積 約3,600 m<sup>2</sup>/g  
 水素貯蔵能  
 2.2 wt% H<sub>2</sub> 室温, 34 MPa  
 更なる向上が金属の添加で可能



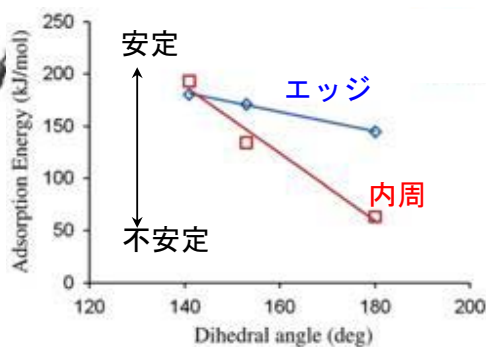
西原ら(2009)

【公開】事業原簿p. Ⅲ2.4-(41)~(42)

## ZTCの湾曲した炭素平面のどこに水素が吸着するか？



	E <sub>ad</sub> (kJ/mol)	
	center	edge
C <sub>24</sub> H <sub>12</sub>	63.5	<u>144.9</u>
C <sub>20</sub> H <sub>10</sub>	151.3	<u>171.1</u>
C <sub>28</sub> H <sub>14</sub>	134.1	<u>167.4</u>
C <sub>36</sub> H <sub>12</sub>	<u>193.1</u>	180.6

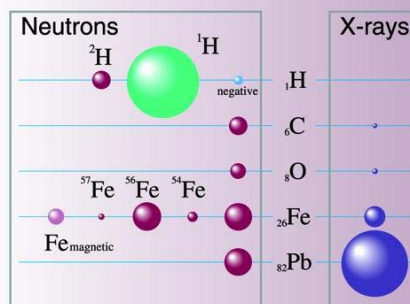


【公開】事業原簿p. Ⅲ2.4-(4)~(8)

## 中性子研究の概要

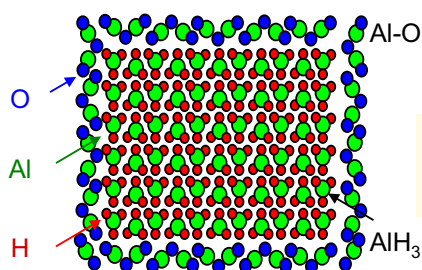
- 世界最高強度中性子施設J-PARCを活用した水素貯蔵材料の評価装置の開発と水素貯蔵材料への適用
  - 中性子全散乱装置NOVAの建設
  - 水素貯蔵材料計測用の周辺設備の整備  
(ビーム施設に高圧水素設備を導入)
  - 産業界からの提供を含む水素貯蔵材料の評価

水素は原子核と相互作用する手法以外で「見る」ことは難しい  
 中性子が最適かつ事実上唯一の方法  
 結晶のみならず、ナノ構造、非晶質、液体状態の水素貯蔵材料の計測・解析ができる装置を建設



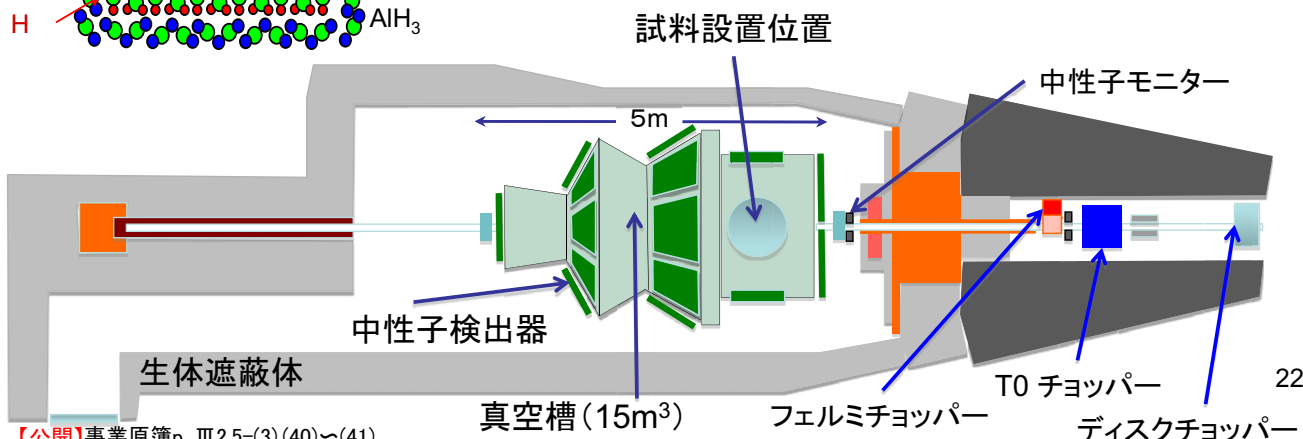
## 超先端的解析評価手法の開発

水素を「見る」には中性子が必須 → 世界最強の中性子源(J-PARC)を活用  
 23台しか装置設置ができない中、水素貯蔵材料専用装置を建設 (NOVA)



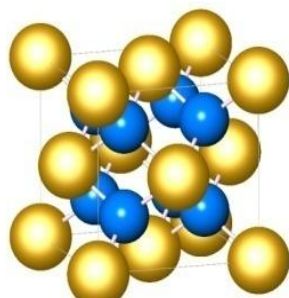
表面Al酸化物の測定  
 ( $\chi$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$ , amorphous- $\text{Al}_2\text{O}_3$ )

アルミニウム水素化物表面に存在し反応を阻害している微量のアルミニウム酸化物の検出に成功

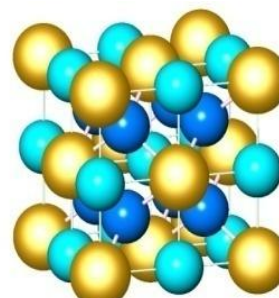


## J-PARCとSPring-8の連携による成果

究極あるいは限界の水素貯蔵量を調べるのが、本事業のねらい  
 Laは水素/金属が3に達する究極の高吸蔵量材料のモデル元素  
 水素:金属が2:1と3:1の水素化物しか知られていなかった  
 本事業で水素:金属比が1:1の水素物を11万気圧の基で合成に成功し、J-PARCとSPring-8の両方のデータを使って構造を決定



2水素化物  
(H/M=2)



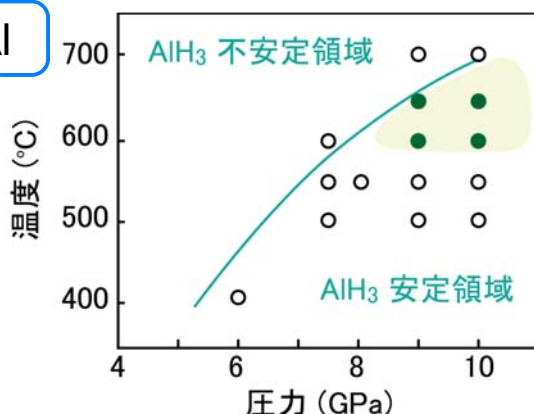
3水素化物  
(H/M=3)

## 高圧容器用実用合金A6061合金の水素化

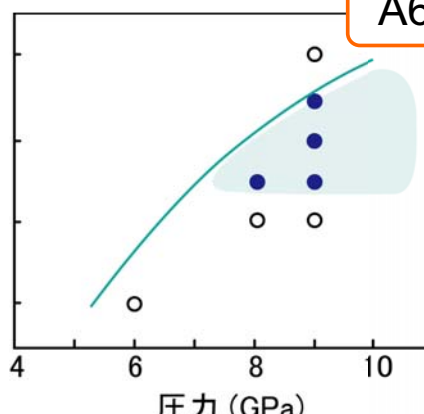
水素高圧雰囲気下で使用可能な唯一のアルミニウム合金**A6061-T6合金**

高温(数百℃程度)、高圧(数万気圧)で水素化挙動を検証

純Al



A6061-T6

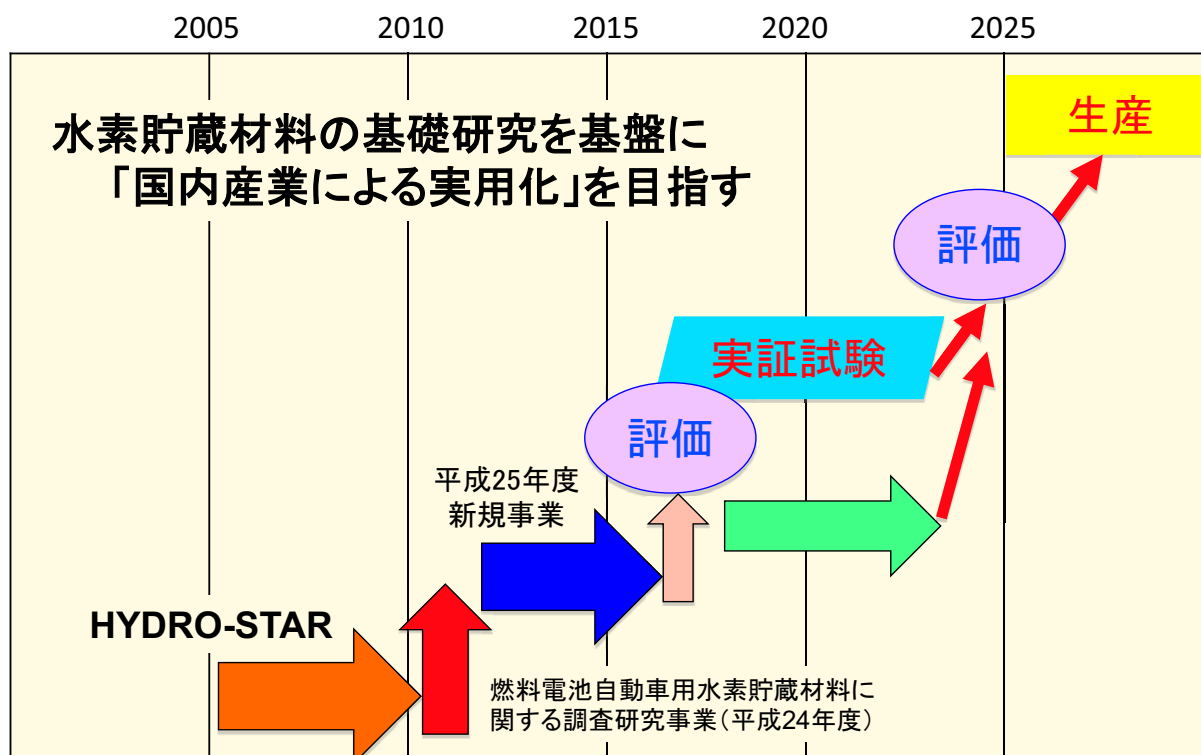


水素化物の生成条件は純アルミとほぼ同じ  
 室温、10 MPa 程度の条件では水素化物は不安定  
 生成するAlH<sub>3</sub>の形状に違い

生成したAlH<sub>3</sub>  
顕微鏡像



## 燃料電池自動車の大量生産を目指して



【公開】事業原簿p.Ⅱ-(43)~(44)

25

## 成果発信

- ・ 成果報告会の開催（毎年）
- ・ 秘密保持契約を締結した企業との推進会議開催（毎年）
- ・ 論文数 266報
- ・ 海外の有名出版社より成果を書籍として出版準備中
- ・ 成果報告書の発行(2012年2月)
- ・ プレス発表 8件（日本経済新聞等に掲載）
- ・ テレビ放映 3件
- ・ 「J-PARC高強度全散乱装置の完成式典」（平成21年6月2日）など
- ・ 測定サンプル数(2008～2011年度) 2300種以上
- ・ News Letterの発行(6回発行、送付先～800)
- ・ ホームページの開設 (<http://hydro-star.kek.jp/>)

【公開】事業原簿p.Ⅲ1-(7)~(12)

26

## PLとしての活動・成果

- ・事業の適切な運営  
予算、研究テーマ連携、成果の取り纏め、SL会議等の主催
- ・事業内外との連携の促進  
本事業内、NEDO事業内、産業界、国際案件
- ・広報活動  
(ホームページ、パンフレット製作、ニュースレター発行)  
テレビ放映  
2008年12月19日 NHK水戸放送局 わいわいスタジオ  
2009年1月29日 テレビ朝日 報道ステーション
- ・招待依頼講演 72件 (内 海外 37件)
- ・受賞  
Herbert C. Brown Award for Innovations in Hydrogen Research,  
Purdue University, USA(2008年4月)  
IPHE Technical Award, IPHE (2010年5月)

27

【公開】事業原簿p.Ⅱ-(33)~(34),Ⅲ1-(7)~(12)

## まとめ

### 目的

ガス状である水素をコンパクト、高効率、安全に輸送貯蔵するために必要な高性能水素貯蔵材料の研究開発指針を産業界へ提供する

### 成果 ○材料開発指針

既存材料の性能向上指針

新規材料の提案

○超先端的水素貯蔵材料評価手法の確立

○国際共同研究

### 今後の展開

事業の成果を最大限に活用しつつ、実用化に資する高性能水素貯蔵材料の実現を目指す

28

【公開】Ⅲ1-(1)~(6)