

研究評価委員会
「水素貯蔵材料先端基盤研究事業」(事後評価)分科会
議事録

日 時：平成 24 年 7 月 30 日 (月) 10:00～18:00

場 所：WTC コンファレンスセンター Room A

出席者(敬称略、順不同)

<分科会委員>

分科会長	内田 裕久	東海大学 工学部 原子力工学科	教授
分科会長代理	西宮 伸幸	日本大学 理工学部 物質応用化学科	教授
委員	池田 哲史	水素供給・利用技術研究組合 技術本部 兼 F C V・インフラ実証部	技術副本部長 部長
委員	井上 博史	大阪府立大学 大学院工学研究科 物質・化学系専攻	教授
委員	笠井 秀明	大阪大学 大学院工学研究科精密科学・応用物理学専攻	教授
委員	杉本 秀彦	中央大学 理工学部物理学科	教授
委員	宮崎 淳	岩谷産業株式会社 技術部 兼 水素エネルギー部	常務執行役員 部長

<推進者>

橋本 道雄	NEDO	新エネルギー部	部長
山本 将道	NEDO	新エネルギー部	主任研究員
内田 高史	NEDO	新エネルギー部	主任
橋本 秀昭	NEDO	新エネルギー部	主査
畠山 正博	NEDO	新エネルギー部	主査
藤井 千弘	NEDO	新エネルギー部	主査

<実施者>

秋葉 悦男	産業技術総合研究所 エネルギー技術研究部門 兼 九州大学 大学院機械工学部門	客員研究員 教授
中村 優美子	産業技術総合研究所 エネルギー技術研究部門	グループ長
小島 由継	広島大学 先進機能物質研究センター	センター長
大友 季哉	高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所	教授(研究主幹)
町田 晃彦	日本原子力研究開発機構 量子ビーム応用研究部門 量子ビーム物性制御・解析技術研究ユニット	副主任研究員
小川 浩	産業技術総合研究所 ナノシステム研究部門	主任研究員
伊藤 仁	日産自動車(株) 総合研究所 先端材料研究所	アシスタントマネジャー
青木 正和	(株)豊田中央研究所 電気化学研究部 固体イオニクス研究室	推進責任者
浅野 耕太	産業技術総合研究所 エネルギー技術研究部門	研究員
松田 潤子	九州大学 カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所	助教
大貫 惣明	北海道大学 工学研究院	教授

磯部 繁人	北海道大学 創成科学研究機構	特任助教
片山 芳則	日本原子力研究開発機構 量子ビーム応用研究部門 量子ビーム物性制御・解析技術研究ユニット	ユニット長
青木 勝敏	日本原子力研究開発機構 量子ビーム応用研究部門 量子ビーム物性制御・解析技術研究ユニット	客員研究員
齋藤 寛之	日本原子力研究開発機構 量子ビーム応用研究部門 量子ビーム物性制御・解析技術研究ユニット	副主任研究員
小西 啓之	日本原子力研究開発機構 関西光科学研究所 プロジェクト推進室	室長代理
大石 泰生	高輝度光科学研究センター	主幹研究員
平尾 直久	高輝度光科学研究センター	研究員
加賀山 朋子	大阪大学 極限量子科学研究センター	准教授
松岡 岳洋	大阪大学 極限量子科学研究センター	特任助教
Mirza Jamil Ahmad	東北大学 大学院工学研究科	ポスドク
竹市 信彦	産業技術総合研究所 ユビキタスエネルギー研究部門	研究員
佐原 亮二	東北大学 金属材料研究所計算材料学センター	准教授
京谷 隆	東北大学 多元物質科学研究所	教授
小口 多美夫	大阪大学 産業科学研究所	教授
福永 俊晴	京都大学 原子炉実験所	教授 (副所長)

<企画調整>

中谷 充良	NEDO 総務企画部	課長代理
-------	------------	------

<事務局>

竹下 満	NEDO 評価部	部長
三上 強	NEDO 評価部	主幹
加藤 芳範	NEDO 評価部	主査
松下 智子	NEDO 評価部	職員
中村 茉央	NEDO 評価部	職員

一般傍聴者 5名

議事次第

<公開の部>

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
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
 - (1) 事業の位置付け・必要性
 - (2) 研究開発マネジメント
 - (3) 研究開発成果
 - (4) 実用化の見通し
6. プロジェクトの詳細説明
 - 6.1 水素貯蔵材料先端基盤研究事業
 - 6.2. 金属系水素貯蔵材料の基礎研究
 - 6.3. 非金属系水素貯蔵材料の基礎研究
 - 6.4. 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
 - 6.5. 水素と材料の相互作用の実験的解明
 - 6.6. 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

<非公開の部>

7. 実用化の見通し

<公開の部>

8. 全体を通しての質疑
9. まとめ・講評
10. 今後の予定、その他
11. 閉会

議事録

(公開セッション)

1. 開会、分科会の設置について、資料の確認
 - ・開会宣言（事務局）
 - ・事務局加藤主査より、分科会の設置について資料 1-1 及び 1-2 に基づき説明があった。
 - ・内田分科会長挨拶
 - ・出席者（委員、推進者、実施者、事務局）の紹介（事務局、推進者）
 - ・配布資料の確認（事務局）
2. 分科会の公開について

事務局より資料2-1に基づき説明し、今回の議題のうち議題7「実用化の見通し」を非公開とすることが了承された。

3～4. 評価の実施方法と評価報告書の構成について

評価の手順を事務局より資料3-1～3-5、資料4に基づき説明し、了承された。

5. プロジェクトの概要説明

推進者（山本将道 NEDO新エネルギー部主任研究員）より資料6に基づき説明が行われた。

- (1) 事業の位置付け・必要性
- (2) 研究開発マネジメント
- (3) 研究開発成果
- (4) 実用化、事業化の見通し

説明に対し以下の質疑応答が行われた。

(内田分科会長) 有り難うございました。では、ただいまのご説明に関しまして、ご意見、ご質問等ございましたらお願いいたします。技術の詳細につきましては、後ほど議題 6 で議論したいと思いますので、事業の位置付け・必要性・マネジメントについてのご意見をお願いいたします。

(西宮分科会長代理) 研究開発マネジメントの計算科学グループのところで、東北大学の多元研と日産自動車に参加していただいた経緯のところで、ゼオライト系と言われましたが、ゼオライト中で作る、特別なカーボンでということですね。

(NEDO・山本主研) 秋葉プロジェクトリーダーに補足していただきます。

(産総研・秋葉客員研究員) そのとおりです。実は先行しておられた NEDO の事業で東北大学の京谷先生と日産自動車のグループが大変おもしろい物質を発見しておられました。それを HYDRO STAR のほうではプロジェクト間の連携ということで、計算科学のほうをサポートしました。中間評価のときの我々へのご提言ということで、計算科学と実験で新物質を作っていくということで取り込んだというのが実態です。

(西宮分科会長代理) 質問は、この後に詳しい話が出るのかもしれませんが、特別なカーボンで、それが 77K だけでなく、室温で水素をたくさん吸着するというのは驚異的なことです。室温でも数パーセント吸着することに関して計算科学でそこをブレイク出来ると考えたのかどうか、お聞きしたかったです。

(産総研・秋葉客員研究員) 当時、室温で 2%強くらい水素吸着がある。これは西宮先生がおっしゃっているとおり通常では考えにくい世界最高性能で、世界のその分野の研究者がまねをしようとしたのですが、そのへんはなかなか届かない。長年培われた特別な技術を使っておられました。しかもカーボンも特殊な形状をしておりまして、今日は小川 SL が 1 枚だけスライドを後でお見せしますが、グラファイトは普通は平面ですが、ゼオライトを利用して作ったカーボンは湾曲していて、例えばその湾曲の度合いと水素の吸着、あるいは吸着エネルギーを計算科学により計算をしております。計算結果を利用して、なぜこのカーボンがいいか、さらにそれをどういう方法を使って向上出来るかなどを HYDRO STAR の中でやってまいりました。

(内田分科会長) また細かいことは、後ほどの具体的などころでご質問していただきたいと思います。ここでは、事業の位置付け・マネジメントに関しましてお願いいたします。笠井先生どうぞ。

(笠井委員) いくつか質問があります。予算のどのぐらいが設備、つまり高エネルギー加速器研究機構、日本原子力研究開発機構に流れて使われたのでしょうか。

(NEDO・山本主研) 手元にございませんで、後日。

(笠井委員) 例えば何割ぐらい、半分ぐらいとかそのあたりを。後日でも結構です。

(NEDO・山本主研) この全体の中でということでしょうか。

(笠井委員) 45億6700万円のうちの何割が高エネ研、原研の設備に使われたかということです。これは後でもいいです。それからこのプロジェクトでどれぐらいの若手研究者が携わって、このプロジェクト終了後のそれらの人のキャリアパスはどうなっているのでしょうか。無職になっているのか、そういうことはどうでしょうか。

(NEDO・山本主研) 先ほどの予算の配分は後で実施者ごとの配分額を整理させていただきまして、委員の皆さま全員に提出いたします。次の若手のキャリアパスについては、このプロジェクトが終わって1年目、2年目ですぐ成果が出るかどうか分かりませんが、そこは実施者の方々から特にこういうケースがあるというのがありますでしょうか。

(産総研・秋葉客員研究員) 資料があります。

(NEDO・藤井主査) そちらにつきましては、資料が厚くて恐縮ですが、「事業原簿」の4、「実用化の見通しについて」というところの3ページからの「波及効果」というところで、各グループの人材育成について記載させていただいております。そちらのほうでご確認いただければと思います。一例としましては、金属系グループのところで博士研究員、特任研究員、テクニカルスタッフは7名、そのうち4名はプロジェクトの従事した後も引き続きポストを得て、水素貯蔵材料の研究開発に携わることになったことから、水素貯蔵材料の研究の人材の確保、育成につながったと考えます。このような方たちです。中村先生、もし何かご発言がございましたらお願いします。

(産総研・中村グループ長) ページ数は下にローマ数字のIVの(3)から始まっているところで、各グループ順番に少しずつ記述があります。ここに書いたとおりですが、我々のところは研究所なので他のところよりもポストなどの雇用数が少なかったかもしれませんが、それでも全体で7名雇用させていただき、人によりますが、2年、3年一緒に研究をさせていただきました。幸運なことにそのうちの4名は、プロジェクトが終わった後も企業や大学、研究所なりでポストを得まして、水素貯蔵材料の研究をいまも一緒にやっている方がいます。このプロジェクトでいろいろ経験を積んだことで、彼らのキャリアパスとしても非常に役立ったと考えています。

(笠井委員) ありがとうございます。予算の使い方そのあたりが気になりました。

(内田分科会長) これはぜひ、きちんと設備にいくら、人件費にいくらと、こういうものはある程度パーセンテージでも簡単に出来ると思いますので、後ほど委員の先生方にその情報をお渡しください。

(NEDO・山本主研) 分かりました。

(笠井委員) もう少し続けさせていただきます。成果ですが、資料を見ていると、例えば「水素貯蔵材料開発の素地を構築した」というような文学的な表現をしています。これでは、どう評価して良いか分からないような表現です。また、言葉で言われた「指針を提供した」など、評価者としては評価して良いものかどうか分かりにくいのですが、このあたりはNEDOのマネジメントとしてはどうでしょうか。

(NEDO・山本主研) この指針についてですが、指針をどう解釈するか、指針の中身がダメであればこんなのは成果でも何でも無いという世界かもしれません。お配りしたこのA4縦紙の指針の2ページ目のところで、最初の金属Gのところの考え方を簡単にご説明したいと思います。このNEDOとHYDRO STARのロゴが入っている資料です。こちらは参考のために番外で配らせていただいております。例えば2ページ目の指針の1は金属Gですが、多量の水素を含有する役割のセルと水素を吸蔵しつつ全体の構造を維持するセル、それを互いに積層しながら設計することで、従来の合金よりも貯蔵量の多い材料を得ることが出来るということを見出しております。これは水素に対するセルの構造のものだけを並べていきますと、水素を吸蔵するなかでいろいろ構造が変わってしまっ結果として

そんなに貯蔵しなくなってしまうということに対し、構造を維持するセルも重ね合せて設計することで水素貯蔵量を最大化出来ます。これはランタンニッケル系のところで産総研などで見出していただきました。こういうのが1例です。他にも各グループの主な成果をこの指針の中で説明させていただいております。これをつぶさに見てまいりますと、NEDOとしても今後の材料開発に向けての非常に大きな一歩と受け止めておりますので、優秀な成果であると判断したわけです。この中身の価値が本当にどれぐらいあるのかどうかを見きわめていただく意味で、午後の細かいプレゼンと討論の中で掘り下げていただければと考えております。

(内田分科会長) いまの指針のところですが、この後の午後の具体的な発表のときに各プレゼンテーションをおやりになる方が良いと考えます。自分の出した成果とそれがどういう指針になったのかということは明確に説明をしていただきたいと思います。

(NEDO・山本主研) そうですね、ありがとうございます。

(笠井委員) もう少しお時間を頂戴いたします。こういう評価を通して、NEDOとしての今後の施策を考えていくという話をされましたが、最初にもお話がありましたが、NEDOや経済産業省の中だけで閉じるのではなく、この基礎科学の関係では文部科学省でも力を入れておられると思います。例えば元素戦略のようなかたちをとって、お互いにそういう情報を交流させてやることも考える必要があるのではないかと思います。それからこのプロジェクトの公募があった時に、私はその公募を見ましたが、応募は何件かありましたでしょうか。普通ではとても応募出来るような類のものではなかったような気がします。

(NEDO・山本主研) 具体的にどこが問題でしたでしょうか。

(笠井委員) 問題ではないのですが、ある程度決まったかたちでの公募がされているような印象を持ちました。我が国の将来が関わってきますので、いつでも競争をするかたちをとるというのも問題があるとは思いますが、そればかりではなく、国の施策として将来を見据えてあるところにはそれなりの予算を投下するというのは大切なことだと思います。いつもいつも公募するかたちでやるというのはもちろんありますが、その公募が我々から見ると公募にはなっていないような印象を持つ場合もある。そのあたりもご検討されたら良いのではないかと思います。

(NEDO・山本主研) まず1つ目の文科省等との連携につきましてはそのように感じています。NEDOプロでよく言われるのが実用化、企業化、産業化で、こういう基礎研究をやっても意味がないとたまにご指摘いただきますが、基礎まで掘り下げていって初めて見えてくる場合がございます。今回のSPring-8にしてもそうですが、基礎と産業をつなげるようなプロジェクトはNEDOとしてしっかりとやっていきたいと思っています。ただ、この水素貯蔵材料等水素の研究に関する材料開発に片っ端から全部予算配分してはお金が足りません。ですからNEDOとしての限界も感じています。ついては、日本中の大学との関係において学会での発表等を見ながら、それぞれがどういうところの研究に配分をして取り組んでいるのかをウオッチすると、例えばJSTが意外と近いところをやっている。燃料電池や水素の分野における基礎基盤的な領域で、NEDOはこういうところを主体的にサポートしていくという一方で、その外側に広がっている、特にこの材料開発のところについては文科省側やJST側とどういう連携が出来るのかという意見交換を始めています。今後、そこをもう一歩踏み込んで、特に貯蔵材料の難しいところ、燃料電池でいうと脱白金触媒のところは非常に難しく、簡単に2~3年やって成果が出る話ではありませんから、そういう分野において、どういう連携が出来るかということとはさらに積極的に文科省側、JST側とも議論させていただきたいと考えております。それから公募の件ですが、次のプロジェクトにおいては、こういった小さいプロジェクトを3つぐらい束ねて大きなプロジェクトにしようとしています。そこでは規制緩和等につなげていくような、いろいろな材料の開発とデータ取りのような基盤的なところもありますし、今回のこの指針を活用して具体的な民間

企業を主体とした材料開発をサポートするような類のものもすべてがごちゃ混ぜで入っています。今の時代は全部公募でやれということになっていますので公募でやりますし、その中で最初から決まっているようなものでは全くございません。プロジェクトが小さくなればなるほどそういうイメージを持たれてしまうのかもしれませんが、今回はこの水素の製造、輸送、貯蔵そして利用に必要な技術開発を、基盤と実用化の両方とも盛り込んだ包括的なプロジェクトを立ち上げます。その中で公募をさせていただきます。その中でいいものがあれば、分野ごとの縦割りはせずに、今後社会的に重要なもの、技術的に重要なものを NEDO の方で選ばせていただき、採択をしていく方向でやろうかという議論をしております。そのように大枠でやるということで、そういったご懸念や弊害は少しでも解消出来るのではないかと認識しております。この説明でよろしいでしょうか。

(産総研・秋葉客員研究員) ちょっとよろしいでしょうか。最初の公募のときに在職していたのは私だけです、その時の事情です。NEDO は1つの提案に対してもう1つの大変いい提案も入れて、コンバインしつつ大きなプロジェクトにすることをされました。応募したいいくつかのチームを合わせて1つのチームにしております。そして、MEXT と METI については、今プロジェクトは基礎研究ですので、終了時点で METI と MEXT さんの対応部署がそれぞれ委員会を作ってご検討いただきました。ですから先生のご懸念されたようなことはないと思います。

(池田委員) 質問ではありませんが、正確な情報を共有するということでコメントさせていただきます。14 ページのところのご説明で、現在 FCV 用高圧容器は 70MPa と 35MPa の両方があるということでした。確かに今、走っている車は両方の圧力がありますが、2015 年以降は量産ベースで提供出来る、普及開始に向けた FCV は全て 70MPa での提供ということになっております。当面は圧縮水素の FCV は 70MPa で世の中に現れます。おそらくその後、吸蔵材が使えるようになったら、より低い圧力で積めるということになると思いますが、少なくとも最初の時点では 70MPa の車が走り出すということになります。以上、コメントさせていただきます。

(NEDO・山本主研) NEDO の立場から言い切れなくて申し訳ございませんでした。その関係で補足させていただきますと、実はこのプロジェクトが終わって今年度、いま実用化に向けての検討・調査を行っていただいております、その中で産業界との連携を強化していくという1つの取り組みですが、これまでこのプロジェクトの中で表に委託先として出てきていただけていないトヨタ様やホンダ様も、実は今回の調査の中では実際に参加していただいております、自動車メーカーが今後求める水素貯蔵材料はこういうものかということも、この中でしっかり議論をしていただき、そしてそれに答えるような研究開発の課題は何かという議論をこれからしていこうということで、今年度中にその議論を始めたところでございます。

(内田分科会長) いまおっしゃったことはとても大事なことだと思います。このプロジェクトは産学官の体制でおやりになってきています。そうすると、その成果は大学や研究所の学術的な成果だけではまらずいわけです。今日見せていただいただけでも、学術的な成果から見たら素晴らしいものがたくさんあると思います。問題は、その成果を産業界のほうで実際に生かし、それを社会に役立てて、儲けていただくということがとても大事です。儲けていただいた結果、税金を払っていただき、その税金が社会に還元されていくという流れで初めて産学官の連携が回るわけです。企業名はともかくとして、今おっしゃったような具体的な、こういう基礎研究の成果に関連してどういう業種の企業が実際にこういうところに関連してきたのか、逆にそこから課題や指針との関連性が見えてくるのではないかと思います。いかがでしょうか。

(NEDO・山本主研) この分野はすぐにはモノにならないということで、NEDO のこれまでの取り組みにおいても、例えば自動車メーカーやユーザー側の企業も入りづらい分野であると思っています。昔からタンクを作るサムテックさん、日重化さんなど一部の材料系のメーカーの方々にご参画いただいて

いますが、それではまだまだ実用化に向けての広がりが少ないですし、より多くのプレーヤーに入っていたかなければ本当の意味でのブレイクスルー、競争というのは出てこないという気がします。特に重量パーセントで 5%を超えて 6%、7%を本当に出していくのであれば、もっとプレーヤーを入れなければいけないと思っております。そういう観点から、今年の調査においてもそうですが、これまでのプレーヤーに加え、新しくユーザー側などのその他の開発材料メーカーにも広く声を掛けまして、今年 1 年調査をやるとともに、来年度の新規のプロジェクトに向けて新しいプレーヤーをいかに呼び込めるかということも課題だと思っております。来年度以降の次のプロジェクトにおいては、産学連携の体制を条件にするとまでは申しませんが、大学だけの短期の体制でやるというよりも、企業化、産業化、実用化につながるような体制での取り組みが必要になってくると思っております。今はまだ検討中ではありますが、そういうことを想定して議論はしたいと思っております。

(内田分科会長) 水素吸蔵合金あるいは水素を吸蔵する材料の研究はおそらく半世紀ぐらいずっとなされてきた中で、これだけ集中的に徹底的に基本的なことを攻めたということは例がないと思います。そういう意味で、今回この NEDO のプロジェクトで行われたことは学術的にはすごく価値があると思っています。ですから、あとは社会との連携のところ、産業界との連携のところだけもう少し見えるようにされると、外に向けての発表も説得力があるという印象を持ちました。

(NEDO・山本主研) ご指摘のとおりでございます。次のフェーズでは当然産業界との連携を見せていくことを意識しながら取り組んでいきたいと考えています。

(宮崎委員) いまのところと少し関連しますが、指針では、FCV の容器が今はメインになっていると思いますが、その本格普及の前、これは微妙で 2015 年ぐらいから出てきて、我々インフラ業界では 70MPa で充てん出来るものを 100 カ所整備しましょうということで既にスタートして、いろいろな技術開発がされております。実用化のところになると思いますが、いま出来るという意味ではありませんが、もう少し年次的にこの材料開発の方向性をお示しいただかないと、我々サイドとしてはどういう方向で検討を始めるかなどいろいろ問題が出てくるのではないかと思います。もう 1 点ですが、分科会長がおっしゃったように、他の分野でも FCV の容器はこうだけれども、例えば今はスマートコミュニティの電力貯蔵媒体などで MH 容器を使おう、あるいは我々が水素ステーションに送るのでも、吸蔵合金の容器やこのライナーなどに使えばそういう可能性もありますので、出来る限り現在の状況をオープンにしていただければ、我々としても非常にそれに沿った開発が出来るのではないかと思いますので、コメントとして述べさせていただきます。

(NEDO・山本主研) ありがとうございます。この水素貯蔵材料の実用化の時期をどう見るかということも含め、燃料電池水素技術分野全体の見通しをどうするかということも重要になっていると思っております。今後、その政策的な見直し等、産業界が目処をつけてきた実用化のいろいろなシナリオとも合わせながら、NEDO としての技術開発シナリオをこれから点検していきたいと思っております。そういう中でこの水素貯蔵材料の実用化の時期についても、我々の研究開発ターゲット、特に長期のターゲットですが、2025 年なのか、もっと急がなければいけないのではないかとこのところからはこれから検討してまいりたいと思っております。もう 1 つは何でしたでしょうか。

(宮崎委員) ほかの用途です。

(NEDO・山本主研) そこも NEDO も重要だと思っております、車載用のタンクにとりわけニーズが高いわけですが、やはり高压タンクは取扱い上難しい問題があったり、コストも高かったりするものですから、一番難しい車載用タンクのスペックで良い技術が見出されれば、その途上にあっても定置用に展開できるのではないかと、いろいろなアプリケーションがあり得ると思っております。そういうところもプロジェクトの本流の目的にははしませんが、技術開発の進展に合わせてそういう展開も視野に入れてプロジェクトのマネジメントをしていきます。例えば水素の貯蔵を車載用のタンクにししか

使ってはいけませんということではなく、その可能性が出てくればそこに向けたアプリケーションも事業者の皆さまと一緒に考えていくということです。

(内田分科会長) ありがとうございます。今のはまさに産業界からのご指摘かと思しますので、必ずしも車載ではなくほかの用途にも使えるような水素吸蔵材料というものが出てきてもいいだろうというお話かと思しますので、よろしくお願ひしたいと思ひます。

(NEDO・山本主研) ありがとうございます。

(内田分科会長) それでは時間がまいりましたので、次に進みたいと思ひます。

6. プロジェクトの詳細説明

6.1 水素貯蔵材料先端基盤研究事業

秋葉プロジェクトリーダーより資料6-1を用いて説明があり、説明に対して以下の質疑が行われた。

(内田分科会長) ありがとうございます。それでは、ただいまのご発表に関しましてどうぞご質問、ご意見をお願いいたします。

(宮崎委員) 私が理解できていなかった1点だけ簡単な質問です。この開発の材料について、当然高機能ではありますが、その温度、圧力等の範囲についての規定はありますか。特になくてもどんどんたくさん吸えばいいという理解でしょうか。

(産総研 秋葉客員研究員) 私どもが進めていく中で、実際に温度などの条件は必ずしも明示はしておりませんでした。お手元の指針を見ていただきますと、基本的には車載出来るものに収斂しております。ですから、強烈な指導をしたわけではございませんが、その指針のほとんどは燃料電池自動車の車載に向いている材料開発のための指針になっていると思ひます。

(西宮分科会長代理) 超高压のことでお聞きしたいと思ひます。24ページの AlH_3 を超高压で合成できたことは成果として特筆されると思ひますが、その後の展開に少し不満を持っています。せっかく出来たのだから、例えば合金をもっとやるとか、あるいは Mg をやってみるとか、もっと他に展開があったのではないかと思ひます。まだ発表していないそういう成果があるのであれば紹介してほしいと思ひます。というのは、 La 、 Ti 、 Zr などは単体に比べて合金ですごく平衡圧が上がるということがありますが、 Mg については Ni や Cu 合金にしてもほとんど変わらないということが半世紀前から分かっているわけです。それがどう変わっていくかと思ひて注目していました。つまり、 Mg は合金の相手がないものだから、なかなか研究ができなかったわけです。しかし超高压にしたらもっともいろいろなことが出来るのではないかと思ひて期待していました。合金化したけれどもダメだったのか、そのあたりをお聞きしたい。

(産総研 秋葉客員研究員) Al と Mg と Ti は、先生もご存じのようにクラーク数の上から10位に入っている、軽くて、しかも地殻上に非常に多い金属で、もしこれが水素を大量に、それも比較的簡単に吸蔵、放出することが出来れば、これこそ我々が求めているもののわけで、それは先生も私も実施者側も同じだと思ひます。 Al に関しましては後ほど町田SLのほうから、例えば合金化等について成果の一端をご紹介いたします。それから、中間評価の後に公募で東北大の工学部と産総研に参加していただいたのは、実はあそこで Mg 系と Li 系の高压での新物質探索を非常に熱心にやっておられたということで、まさに西宮先生がおっしゃったような高压下で、例えば非常にアクティビティの高くなった水素、水素流体を使って、 Al 、 Mg 、 Li という我々にとって非常に魅力のある金属との反応を、非常に活性な状態、あるいは体積を少し縮めた状態で行うことによって、材料開発の道しるべが出来ると

いうことで現実にやっております。ですから、午後になりましたら町田 SL のほうからご説明いたします。恐縮ですが、詳細はそのときにご質問いただければ幸いです。ご満足いただけるようなデータが出ていると私は思っております。

(井上委員) 成果のところ、最終目標は材料の開発指針を出すということで一部出されたと思いますが、そのときに例えば 7.5wt% を超えるとか目標値が最初にあがっていますか。

(産総研 秋葉客員研究員) 目標値に関しては、このプロジェクトの場合はございませんでした。理由は、そのときの水素製造・輸送・貯蔵というプロジェクトが NEDO 事業で走っておりまして、そちらのほうではクリアな目標がございましたので、我々は後発で入っていったものですから、それとは明確に区別をつけるということで、目標値は私どもでは設定をしておりませんでした。

(井上委員) 5 年間やっている間に材料系によっては有望なもの、そうでないものがあると思います。次のプロジェクトに行くためには、ある程度そのへんのこと明確になった材料について次に進むのではないかと思います。今回の指針を見ると、最初に目標値がなかったということで、いろいろな材料について、これはこうしたらいいですよというのがありましたが、その中からこうこういう材料で、こういうふうな手法をすれば将来的に実用までいけますという指針というのが出せるのでしょうか。

(産総研 秋葉客員研究員) 今年、NEDO のほうで、実際に材料を使う自動車 3 社も入られて、調査研究を進められています。私どもが学術的にさまざまな可能性をご提示しました中から産業界のほうで実際にやってみたいものはこれだと、そしてそれについてももう少し詳しく見てみようというのがおそらく今年 1 年の調査研究での作業です。その作業が仮にうまくいきましたら、テーマをきちっと出して、次は企業が中心となって実用化を目指して、我々がそれをサポートするかたちで次の 5 年間研究開発をやって、いいものが出来たら、今度は本当の実証に移る、つまり認証を取るという話に移っていくステージ構成だと理解しております。

(内田分科会長) 私のほうから質問があります。HYDRO STAR の開発指針のところ、金属系グループの指針の 6、これは反応速度向上のための開発指針ということで、拡散のメカニズム、イントリンシックなところをいろいろな元素を置換されたり、添加されたりして追求されていると思います。実用面のほうから見ると、それこそタンクを考えれば、伝熱律速のことであったり、企業さん任せだと言われればそれまでですが、より材料に近いところで見れば表面、界面といったところの問題点というのはどうでしょうか。添加元素をいろいろ変えたり、表面改質みたいなものはこの中には取り入れていないように見えますが、そのへんはどうでしょうか。

(産総研 秋葉客員研究員) 実はこれについてはよく知りませんが、NMR を使って水素のジャンプを見ているというのが実態です。もし先生がおっしゃるように表面を見るということであれば、表面分光がおそらくベストな方法だろうと思います。これについては SPring-8 の軟エックス線を使った表面分光等も実はプロジェクトの中でやっております。今日は時間の関係で発表するかどうか分かりませんが、そちらのほうで実用的な材料、例えば鉄チタンなど以前から表面に酸化物があつてなかなか活性化しにくい物のメカニズムを知るというようなチャレンジもしています。あるいはバナジウム系の BCC 合金の表面が、これは比較的初期活性化しやすいけれども、逆にそれはどうしてかということなどを実際にやっております。資料は準備していないかもしれませんが、ご興味があればぜひお尋ねいただきたいと思っております。

(杉本委員) 有効な材料を開発するという立場から考えたときに、機能を決めている現象や機構、それと同時にそれを担う材料、物質自身の問題があると思います。ここではむしろ現象に重きを置いた研究が行われたと理解してよろしいのでしょうか。あるいは具体的な物質として有望なものがいくつか見つかったという結果があるのかどうか、そのあたりをお伺いしたい。

(産総研 秋葉客員研究員) どちらかというと、化学や材料科学的な観点での材料開発、それから例えば

SPring-8 を使った時間分解の XAFS、それから中性子を使ったこれもある程度時間分解能のある PDF (Pair distribution function) の測定も出来る NOVA の開発などの観点だと思います。先生がおっしゃるような、例えば固体物理の基本まで立ち返ってやれたかという、それは必ずしもこのプロジェクトの主たる目的ではなかったとっております。水素と物質という関係を見ると、具体的に言えば、文科省には水素のアトミクス研究会というプロジェクトがあって、我々があって、それから材料開発のプロジェクトがあって、それで三位一体になるのではないかと考えております。ですから我々はちょうどそのまん中ぐらいの立ち位置だと理解しております。

(笠井委員) 秘密保持契約というのが何度かお話の中に出てきましたが、これは産総研と結ばれているのですか。この図を見るとそうなっています。

(産総研 秋葉客員研究員) 先生のご指摘のとおりで、もしこれをそれぞれバラバラに結びますと膨大な数になりますので、まず産総研と外部協力機関と称していますが企業さんとの間で秘密保持契約を結びます。それから産総研と HYDRO STAR のメンバーやほかの事業のメンバーとで結びます。ただし、それぞれの秘密保持契約の中に「これについても同様とする」という 1 項を入れるということで、入れ籠にしてあります。

(笠井委員) その「外部協力機関」というのは、例えば自動車メーカー、インフラメーカーがたくさん入っているのでしょうか。

(産総研 秋葉客員研究員) それほどたくさんではありません。全部で 6 社ぐらいです。

(笠井委員) その秘密保持契約が少し中途半端な感じがします。指針がそこで開示され、その中で協議されて、その指針に基づいてやろうとすることを考えられるのでしょうか。

(産総研・秋葉客員研究員) 実は指針は最終年度にならないと事実上なかなか難しいので、それまでは、例えば NOVA がここまで建設して、こういう性能がありますので、ではちょっと使わせてもらえないかとか、あるいは SPring-8 でこういう実験をしてみても、こういうところまで分かりましたということ、いわば論文になる前の段階でお互いが共有します。そのときに、講演の段階ではなかなかそれぞれが言いにくいことがあるので、基本的にはポスターを数十枚貼って、そのポスターで実際に自分たちのデータをその企業の方々と共有出来るようにいたしました。

(笠井委員) 私が気になったのは、その秘密保持契約というほどのものではないような、申し訳ないのですが、普通のセンスとはちょっと違うような印象を持ってしまったのですが。

(産総研 秋葉客員研究員) 企業と何かをお話するときには、基本的にはということで、私はこの当時は産総研にいましたが、そういうような下地を固めませんと、結果としては何も起きませんでした、もし何か途中で起きたときにそれ以上進むための下地が出来ているということを作りたかったわけです。

(笠井委員) それは我々の場合も共同研究をやる前に、まずこれを結んでお互いの持ち物を公開して、それでやるかどうかということで共同研究などの契約に進みます。これはそのあたり、次のステップというのが踏みにくいプロジェクトなので、ちょっとそのあたりが……。

(産総研 秋葉客員研究員) 当時は、きっと何かいい物が出てきてとっておりましたのでこういうことになったのですが、たしかにやり過ぎだと思われるかもしれませんが、当時はこれくらいはやろうと燃えていたのでやらせていただきました。

(笠井委員) 分かりました。ありがとうございました。

(内田分科会長) そろそろ決められた時間になりますが、簡単なお質問があれば、では、1 点だけどうぞ。

(西宮分科会長代理) 最初の宮崎さんの質問に関係があります。つまり温度です。液体窒素であればこれだけくつつくというのが、例えば MOF があります、DOE はけっこう頑張っている、しかしここでは全然やっていない。そういうものは車では使えないということが前提でしょうか。

(産総研 秋葉客員研究員) プロジェクトの中ではそういうようなことがなくて、むしろ我々の持っている材料は室温で非常に高い水素貯蔵量があつて、しかもそれを伸ばせるというときに、わざわざ 77K をやるということはなかったのではないかと思います。ただ、個人的な意見ですが、これからは西宮先生がおっしゃるように、プレクールなどがありまして、ステーションにある程度チラーがあるとした場合、低温である程度吸着する材料があればそれを使うというようなオプションも今後はあり得ると思います。ですから、そういったものについて調査研究の中で洗いあげて、再度検討ということはあるだろうと個人的には思います。

(内田分科会長) 先ほど宮崎委員からもご指摘があつたと思いますが、これだけ集中して研究をおやりになつてきているわけですから、この材料を広く、定置型などいろいろな分野で使えるようなこともぜひ考えながらやっていけば良いのではないかと思います。では時間がまいりました。では、ここで昼休みとさせていただきます、続きましては 13 時 10 分から再開させていただきます。以上で終わります。

6.2. 金属系水素貯蔵材料の基礎研究

産総研・中村グループ長より資料6-2を用いて説明があり、説明に対して以下の質疑が行われた

(内田分科会長) ありがとうございます。それでは、ご意見、ご質問をお願いいたします。

(西宮分科会長代理) 先ほどの A2B4 のところはすごく面白いと思いますが、その A2B4 構造を La、Ni ではなく、もっと Mg や Al などに適用して、理想的な別のもので挟んで、安定化された A2B4 で究極的にどこまで水素が入るかということに関してはどうでしょうか。

(産総研 中村グループ長) 結局 A2B4 にどれだけ数として水素が入れられるかということがまずあると思います。先ほどお示しました例では expansion だけ考えると、2~3 倍だと思います。それをキープしつつ AB5 セルに後はどれだけ入れられるか、その挟んだほうにも水素を入れないと全体として上がってこないで、それが普通の AB5 並みに入るとするとトータルで、いまのところだと頑張っても 2(H/M)か 2(H/M)をすこし上回るかだと思います。その場合に A 元素を Ca とか、究極的には Mg、Al などの軽いものにしたときにどうなるかということですが、5wt%に届くか届かないかくらいだと思います。

(西宮分科会長代理) その Mg の相手は何ですか。

(産総研 中村グループ長) いまは Ni で考えています。それが Ni 以外のもっと軽いもので出来れば、もっと(重量あたりの吸蔵量が)上がることになると思います。

(西宮分科会長代理) 分かりました。

(笠井委員) 水素を吸蔵したり、放出したりするときに表面から入っていきますが、どこで解離吸着をするのでしょうか。いちばん上の材料を取った場合、どれが表面でしょうか。積層する場合にどの表面が有効かという質問です。

(産総研 中村グループ長) 実際にこれを鋳造したときにどういうふうに配向するかという話になると思います。

(笠井委員) それを制御することはないのでしょうか。

(産総研・中村グループ長) そういうことはやってみてはおりません。

(笠井委員) それはけっこう大切です。それから、制御して積層できるとすると、いまの発表では水素が溜まる場所と溜まらない場所があるという話でした。では、どうやって水素が溜まらない場所に移動するのでしょうか。

(産総研・中村グループ長) 溜まらないところをどう移動するかということでしょうか。

(笠井委員) 上から入っていくわけですね。表面から入っていくわけですね。そして溜まらないところも通過するわけですね。それはどうやって通過するのでしょうか。

(産総研・中村グループ長) この中にいくつか水素が入るべきサイトがあります。

(笠井委員) 溜まらないところでも通過するところはあるわけですね。では、それはいまの実験の時間分解で見えるのではないのでしょうか。

(産総研 中村グループ長) そこまでの分解能は非常に難しいのではないかと思います。

(笠井委員) 先ほど、ここで見つかったことを産業界の人に説明するという会合を開かれたと言いましたが、こういう話は産業界の人にとって興味があるのでしょうか。私たちも産業界の人と何度も話していますが、「こんなのは使えません」と言われる印象があります。そのあたりはどうでしょうか。フィードバックはありましたか。

(産総研・中村グループ長) 皆さん親切だからか使えませんとまでは言われなかったのか、本当は使えそうなのか分かりませんが、このままで使えるかどうかは別の問題で、ここから何らかの産業界の人が描いておられる材料のヒントになればいいなと思っています。いくつかの産業界の方からはこういうのは面白い、使えそうだという話はいただいたことはあります。

(笠井委員) それと関連し、特許は出されていないのですか。

(産総研 中村グループ長) 特許は出していません。

(笠井委員) そのあたりも、本当に使われるという自信があるならば、特許として出すべきだと思います。

(産総研 中村グループ長) はい。

(内田分科会長) お聞きしたいのですが、ここにはほとんど反応速度のデータが紹介されていません。水素の拡散はもともとかなり速いのですが、この新しい材料を今回いくつか代表例を紹介されていますが、どれぐらい拡散速度が上がったのでしょうか、あるいは、上がる可能性があるのでしょうか。

(産総研 中村グループ長) 拡散についてはほとんどV系のBCC合金を対象にしまして、上のほうの材料についてはNMR的にいまのところ研究はしていません。

(内田分科会長) 例えば先ほどのMg-Ca-Ni合金のPCT曲線のデータを出されていますが、あのへんの反応速度は十分に実用的には対応できる速度でしょうか。

(産総研・中村グループ長) 速いです。この言い方がいいかは分かりませんが、これまでに我々が扱ってきた室温付近で吸蔵を放出するような合金、AB5合金あるいはラーベス相合金に比べて特別遅いということはありません。

(内田分科会長) というのは、バルクプロセスを徹底的にこうやって解明されていて、これはこれで素晴らしいと思いますが、反応速度向上の指針という言葉が出てくると、やはりどうしてもバルク中の水素原子の拡散律速に比べて、合金の表面律速はケタ違いに大きく影響をするということがいちばん大きな問題なので、例えばこういう材料を積層すると水素の共有結合の解離が促進されるようになるとか、何かそういうものもセットで出てこないバルク中だけの現象が強調されても、全体としてのバランスが欠けていると思います。

(産総研・中村グループ長) おっしゃるとおりで、反応速度向上に対してどうしたらいいかということ考えたときには、このバルク中の拡散のことだけを考えるというのは、かなり片手落ちだということとは承知しております。

(杉本委員) 格子欠陥との相互作用についてお伺いしたいと思います。残留水素が大きな原因の1つ、あるいは主要な原因だということですね。そのときに水素が入ったときに空孔も同時に入ってくるのではないかと思います。そうすると、水素が出ると空孔も消えていくわけですね。

(産総研・中村グループ長) それが、ものによって違っていて、今回ご紹介しました AB5 系の場合は水素が吸蔵したときに空孔が入るのですが、普通の場合は水素が放出されるときに空孔は残ってしまいます。そこで先ほどご紹介したちょっと特殊な構造を作ってやった場合のみその空孔が消えるということが分かりました。

(杉本委員) それは時間スケールと測っている温度によるのではないのでしょうか。

(産総研・中村グループ長) そうですね。普通、我々の吸蔵放出実験は室温付近でやっているのですが、室温付近である限りはこういう特殊なものを作らないと水素が出ていっても空孔は消えません。ただこれも、温度を例えば 200 度とか、空孔が動きそうな温度にしてやると、空孔は回復すると思えます。先ほどおっしゃった残留水素との相互作用のことですが、あれは BCC 系の合金の図でして、この場合に室温付近で吸蔵を放出されたときに、放出後に既に 1wt% ぐらい中に水素が残ってしまうのですが、その水素がその場合は中に空孔が残っていて、その空孔と水素がある種のインタラクションをもって安定化してしまい、空孔がない場合に比べ安定化してしまうので、残留を促進しているというか、より安定化する方向にいつているということがデータから分かったということです。(P18)

(池田委員) 説明がなかったページですが、20 ページ、そこに実用形態のイメージとあります。おそらく水素吸蔵合金のアナロジーで考えられていると思われそうですが、1 行で「合金材料を圧力容器に充填したものを」と書いてあります。この 1 行は簡単に出来ることなののでしょうか。現時点で分かっている範囲で結構です。

(産総研・中村グループ長) 今、我々がいちばん実用に近いのではないかと考えているのは、20 ページに書いたようなものでして、チューブの中に合金を入れ、そこにフィルターを入れてあります。これを作るのがどの程度難しいかということについて、私自身がちゃんと分かってはいないのですが、これの前に 35MP 対応で炭素繊維で作ったときの容器に比べると、おそらく製造的には多少容易なのではないかと考えています。

(池田委員) この材料が貯蔵合金のように簡単に充てん出来るようなものかどうか教えてください。

(産総研・中村グループ長) 今、私たちが扱っているものはほとんど吸蔵合金に近いものばかりなので、簡単に空気中で粉碎し、この中に入れるということが可能だと思っています。

(池田委員) 分かりました。

(井上委員) 実際に水素吸蔵量、耐久性、反応速度を見ておられますが、このときに構造プラス粒径のファクターというのはどうでしょうか。

(産総研・中村グループ長) 粒径というのは、普通のパーティクルのサイズでしょうか、それとも結晶子のサイズでしょうか。

(井上委員) どちらでもいいのですが、合金を使っている場合に、それが当然粒子、結晶子が大きくなるほどクラックが入りやすい、割れやすいというのがあります。今日の話ではそういうことが出てこなかったもので、そういうことは関係なく、実際にこの構造が効くぐらいの粒径を使ってやったということなのかということです。

(産総研・中村グループ長) そうですね、実際あまり粒子サイズの効果が効くようなところはやっていないというのが実情です。今日お示したのは普通に溶解法で作って、そのバルクを粉碎して、100~500 μm ぐらいの粒子サイズで実験したものがほとんどです。粒子サイズが効くとすれば、例えば BCC 合金のように非常に割れにくいものをそういう大きい粒径で作ったときに、割れない代わりに欠陥が入りやすいとか、そういうところにファクターが効いてくる可能性はあるかとは思っています。しかし、それ以外のことに関しては、それほどいまのところ粒子サイズが効くファクターがあるとは認識していません。

(西宮分科会長代理) 今日は話されなかったのですが、転位空孔と耐久性の話はこれで分かったとして、

今日の午前中に PL がおっしゃった死蔵水素、その関係について私はもう少し知りたいと思います。つまり、BCC 系とは言っても、元をただせば V で、V であればローワーハイドライド、ハイヤーハイドライドがあるのはもう分かっています。死蔵というのは、ローワーハイドライドが出来るから死蔵だという単純な発想とは違うことを考えておられますか。

(産総研・中村グループ長) そこはすごく難しいのですが、多くの場合は V とまったく同じではありませんが、類似の感じで、まずはローワーハイドライドが出来て、それからハイヤーハイドライドが出来ます。ローワーハイドライドが出来る要因として、1つはそのハイドライドが安定だから、その中にある水素のサイトを占有するのが安定だからということがありますが、それに加えて今回分かったのは、空孔が中に残っていて、その空孔と残っている水素が複合体のようなものを作って安定化するので、より安定なところにいるということです。ですから、いまはほとんど空孔があるものを見ているので、では空孔がなくなった場合にそれがどれぐらい上がってくるかということは非常に難しい。実際にそれを室温付近の安定性まで本当に上げられるのかと言われると、難しいところもあると思いますが、作用としてはそういうものがのっかっているということが、今回分かったことです。

(笠井委員) 水素が固体の中に入っていると粒ではなく量子的な波動性を持っていると思われています。そして、必ずしも一様に分布するのではなく、表面に近いところに溜まりやすいという研究結果があります。そういう空間的に一様ではないということもこの確立された実験手法というのはそういうことも評価することが可能でしょうか。

(産総研・中村グループ長) 我々の手法では難しいと思います。バルク的に見えていますから。それから局所構造も数ナノまでは見えますが、いま先生がおっしゃっているのはもっともっと小さい領域だと思いますので、ちょっと我々が扱っている手法だとそこまでは見えないかなと思います。

(杉本委員) 最初のほうで新しい手法としてその場観察がかなり出来るようになった、時間分解測定環境を作ることが出来たという話をうかがいました。時間分解能はどれぐらいあるのでしょうか。

(産総研・中村グループ長) 本当のカメラの分解能でいうと……。

(日本原子力研究開発機構・町田副主任研究院) 材料物性グループのサブリーダーの町田と申します。先ほどのご質問に対していくつか時間分解測定を実施しておりまして、例えば X 線回折、これは中村 SL のグループと一緒にさせていただいていますが、これに関しましては、構造解析の前提としなければだいたい 100Hz~125Hz ぐらいの時間分解能で測定は出来ております。構造解析をしようと思えばもう少し遅くて、だいたい 2Hz ぐらいの測定になっています。これは測定形式が違いますが、それぐらいです。スペックからいいますと、構造解析を全然しなければ 1kHz までいきますが、試料の量にもよってしまいますので、いまは実効的には 100Hz~125Hz 程度です。

(内田分科会長) そろそろお時間もきましたので、次のご発表に移りたいと思います。ありがとうございました。

6.3. 非金属系水素貯蔵材料の基礎研究

広島大学 小島センター長より資料6-3を用いて説明があり、説明に対して以下の質疑が行われた

(内田分科会長) ありがとうございました。それでは質疑、ご意見をお願いいたします。

(池田委員) 11 ページのグラフを確認させて下さい。これは青い○が……。

(広島大学・小島センター長) この1つだけは 700 気圧の高圧タンクです。

(池田委員) あとは？

(広島大学・小島センター長) NEDO のロードマップです。

(池田委員) 分かりました。黒い丸は全部実験値ですか。

(広島大学・小島センター長) そうですね、はい。実験値と理論値も入っています。例えば $\text{Mg}(\text{BH}_4)_2$ 、
こういうものの水素貯蔵量は密度から計算できますので、体積密度と質量水素密度が計算できます。

(池田委員) それは理論値でしょうか。

(広島大学・小島センター長) はい、理論値です。

(池田委員) 実験値はどれでしょうか。

(広島大学・小島センター長) 実験値は少なくともこれよりも低いので、下にあると思っていただいているのですが、ここは……、あまり実験値は入っていません。

(池田委員) では、理論値ということでしょうか。

(広島大学・小島センター長) はい、理論値と考えていただいたほうが良いです。

(笠井委員) Mg の系ですが、水素を吸着させる時も触媒が要るのでしょうか、要らないのでしょうか。

(広島大学・小島センター長) 時間がなくてお話ししなかったのですが、マグネシウムに水素は室温で当然入るものです。生成熱は $75\text{kJ}/\text{H}_2$ で、発熱反応ですので非常に安定な水素化物を作れます。ただ、実際には触媒がないと入りません。

(笠井委員) そうですね。

(広島大学・小島センター長) 私たちはこの五酸化ニオブという触媒、これはもともとドイツの研究者が見付けたのですが、室温で Mg にこの触媒を使うと入るということを私たちのほうで見付けています。

(笠井委員) 触媒としては何でしたか。

(広島大学・小島センター長) 五酸化ニオブです。ここには書いてありません、すいません。ニオブ酸化物です。

(笠井委員) ほかにもいろいろ触媒としてちょうどいいのがあると思います。

(広島大学・小島センター長) ニッケルなどいろいろ全部やったのですが……。

(笠井委員) それから表面の構造ですが、それもけっこう効いていまして、水素が入りやすい構造もあるし、そのあたりはこの研究を続けられたらもっといいものが出るような気がします。

(広島大学・小島センター長) Ni も室温で水素が入るのを見つけていますが、ただ、 Ni ですと 5% ぐらい入れるのに数時間かかります。これだと室温で 10 秒ぐらいで入りますので、これ以上速いものはなかなかないのではないかと思います。

(笠井委員) いろいろ調べたらいいと思います。

(広島大学・小島センター長) 今、いろいろなものをやっています。ありがとうございます。

(杉本委員) その隣のリチウムとこれと吸蔵のほうはリチウムと H の交換で進んでいくという感じですね。では、水素放出はどのようなのでしょうか。(P10)

(広島大学・小島センター長) 放出も基本的に逆の反応だと思っています。実はこの放出反応にはもう 1 つややこしい機構があって、いったん LiNH_2 (リチウムアミド) が出来るのですが、そしてこの LiNH_2 からアンモニアが出来て、そのアンモニアを介在して水素放出反応が進んでいるということを考えています。ですから、これは複雑です。

(杉本委員) そうすると、繰り返しの吸蔵・放出は難しいということでしょうか。

(広島大学・小島センター長) 数回なら出来ると思います。何十回もやった経験は実はありません。

(井上委員) スライドで教えていただきたいのですが、まず左のほうはニオブの酸化数は基本的には水素の放出のときには変わらないのでしょうか。

(広島大学・小島センター長) 実は最初に五酸化ニオブを入れるのですが、 MgH_2 と一緒に混ぜてヒーティングするのですが、還元されまして、五酸化ニオブも実は変わります。それは X 線吸収で分かったのですが、ニオブオウ (NbO) という状態で触媒能を発揮していることを見付けています。

(井上委員) 右の図で、LiH というのは原子ですか、それともプロトンハイドライドでしょうか。軽元素の場合、いつもどれになるのかなと思っていますので。

(広島大学・小島センター長) 普通に考えると、窒素に着いている水素ですのでプロトンです。こちらもリチウムもプロトンといえば、プロトンプラスカチオンですので、プラス同士で動いているということではないかと考えています。

(井上委員) LiH というのは最初からあるのでしょうか。

(広島大学・小島センター長) いえ LiH はどんどん出来てきます。

(井上委員) そうですね Li⁺、H⁺ もプラスであれば……。

(広島大学・小島センター長) どこかでチャージバランスが崩れるので、どこかから電子をもらわないといけない。ちょっとどこから来ているのか、いま私にも……。

(井上委員) もう1つですが、窒化ボロンから戻すというのがありました。非常に面白いと思のですが、窒化ボロンに水素が着くのは、何故着くのでしょうか。生成の処理をすると、という話が……。

(広島大学・小島センター長) これは赤外のピークを見て付いていると判断しています。だいたい 3000cm⁻¹ に NH の伸縮があって、BH が 2500cm⁻¹ ぐらい出てきますので、着いているのは間違いないのでしょうけれども、おそらく BN というのも二次元構造ですので、ミリングで割ると、端が非常に活性な界面が出来まして、そこに水素が付いているという感触です。

(井上委員) 結合の手が切れたところに水素が来るということですね。

(広島大学・小島センター長) そういうことで付いているのではないかと思います。メカニズムはまったく分かりません。

(井上委員) 分かりました。ありがとうございました。

(宮崎委員) 9 ページの図では右側が再生する図で、この部分がロスアラモス研究所でやられているということですか。

(広島大学・小島センター長) もともとロスアラモスはアンモニアボランから水素が半分ぐらい出した状態のものを、ヒドラジンのアンモニア溶液を使って再生できるということを Science に発表しました。NEDO 関係で私たちと一緒に共同研究をやっていたので、では BN から出来るのではないかとということでこれがスタートしたわけでありまして。ただ BN から再生しようと思うと、どうしてもかなりまだ厳しい。

(宮崎委員) いま現在 5% ぐらいで、やはり 100% ということになるので……。

(広島大学・小島センター長) そうすると、化学的な再生方法ですが、水素量が多いので有望ではないかと考えています。

(宮崎委員) ありがとうございました。

(西宮分科会長代理) 将来 BH₃NH₃ と AlH₃ だというのは奇しくも DOE の結論とまったく同じだと思います。同じところと違うところと分けて考えると、多分このプロジェクトで違うところはナノ複合化のところかと思います。それによって、例えば DOE が出来ないこんなことが出来るというのがありますか。

(広島大学・小島センター長) 実はこの水素化物と BH₃NH₃ を組み合わせるナノ複合化というのは、どこもやれません。別の化合物が出来てしまうという問題があって出来なかったのですが、私たちのところで低温でナノ複合化する手法を開発しまして、例えば NaH と BH₃NH₃ の複合材料というのを作りました。そうすると化合物に比べて水素量が 3%、4% 多い。そういう意味では、複合化させた状態で使ったほうが、より多くの水素を利用出来るという可能性があるかと思います。

(西宮分科会長代理) これをスラリーで使うとか、イオン液体に混ぜるとか、そういうことはもう考えなくてもいいということでしょうか。

(広島大学・小島センター長) そこから先のプロセスは利用形態になりますので……。固体の最大の問題は充填率です。液体では 100%で送れるのですが、固体は出し入れが大変なので、それはどうするかということはプロセス的に非常に問題になってくると思います。

(内田分科会長) いまの質問に関係しますが、先生は燃料電池自動車への搭載が見通せるようにお考えなのですが、実際にどういうふうに積むことをお考えでしょうか。

(広島大学・小島センター長) やはりカートリッジ方式で積んで、そうすると水素が出た後に BN に近い構造が出来ます。それをプラントに持って行き、そこで再生してまた持ってきます。

(内田分科会長) 交換するわけですね。

(広島大学・小島センター長) そうです。軽元素水素化合物はオンボードでチャージは非常に難しいということがあって、やはりカードリッジ方式かなと思っています。

(内田分科会長) そのあたりの取扱いについては、特に難しい問題はありませんか。これよりもっと先の話かもしれませんが、その前の段階で、例えばサイクリックな回数をもっと上げて、安定的に……。

(広島大学・小島センター長) やはりカートリッジですと 1 回だけですから。

(内田分科会長) カートリッジなら何度でも出来ますか。

(広島大学・小島センター長) いえ、もしカートリッジは再生が 100%出来れば何度も使えるので。

(内田分科会長) ですから、その回数をおさえておかないと大変な頻度になってしまう。

(広島大学・小島センター長) いえ、まだいろいろやらなければいけないことがいっぱいありまして、再生の反応率を上げたり、もう少し水素貯蔵量を増やしたりなどやっていかなければいけないと思っております。

(笠井委員) 燃料電池の搭載を考えられていると書いてありますが、作るのはどれぐらいのコストというか、どこか化学メーカーがこれをやろうという気になるかと、そのあたりがけっこう問題があるのではないかと思います。

(広島大学・小島センター長) そのあたりは私には分かりません。ただ DOE もこれを中心の材料としてやっておりますし、化学メーカーも入っていると聞いています。日本ではちょっと分かりません。

(笠井委員) DOE を信頼してそうおっしゃっているのですか。

(広島大学・小島センター長) そうです。

(内田分科会長) このへんはかなり複合化、 BH_3NH_3 等の扱い方が難しいという印象しかありませんが、このへんは先生の見通しではかなり実用的には持っていけそうだとお考えですか。

(広島大学・小島センター長) BH_3NH_3 は非常に扱いやすい、白い粉末のパウダーですし、非常に安全な物質です。これをうまく利用していくことが重要なかなと思います。次はどうやって安全性を高めるかというのも重要な課題になってくると思います。

(内田分科会長) そのへんが具体的な指針ということになっているのですね。

(広島大学・小島センター長) そうです。もし実際に研究開発をするということになると重要になってくると思います。

(内田分科会長) 他にいかがでしょうか。委員の先生方、よろしいでしょうか。はい、ではどうもありがとうございました。

6.4. 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

高エネ研 大友教授より資料6-4を用いて説明があり、説明に対して以下の質疑が行われた。

(内田分科会長) ありがとうございました。それではただ今のご発表に関しまして、ご質問、ご意見がご

ございましたらお願いいたします。

経時変化の追求というのは、どのくらいの速度まで追従できるのでしょうか。例えば水素がジャンプしている中で移動していくようなものにもかなり追従できるのでしょうか。

(高エネ研・大友教授) 2つ方法がありまして、いわゆるこういう経時変化といわれる我々の空間の実時間でそれを見るという意味では、測定時間は短くても数十ミリ秒ですのでちょっと難しいと思います。ただ、この全散乱法というのは水の構造も解析出来ます。水の構造が解析出来るという意味は、水分子が水分子同士の相関を持っていることを観測できるということです。それは水素結合の寿命よりも十分に短い時間で、瞬間写真を撮ることが出来ます。ですからサイトの途中にいる状況がもし安定だったらという言い方では意味が分からないかもしれませんが、そういう何らかの寿命を持つ構造があれば逆に見えますし、サイトにいるのがすごく安定でサイト滞在時間が長いというものであれば、いくら瞬間写真を撮ってもその違いが分かりません。ですから、いろいろな方法があるかと思いますが、中性子の場合には他にもいろいろな拡散定数を測る方法もありますが、NOVAでは今の2つの方法で液体的な構造をとらえられます。もしくはミリ秒とありますが、実はタイムフライトというものを使っています、マイクロ秒で中性子の来るタイミングを見ていますので、繰り返しができるようなものであれば、ひょっとしたらもっと短い時間で構造変化を見ることが出来るかもしれないと思っていますが、そこはこれからいろいろとチャレンジしていかなければいけないと思っています。

(西宮分科会長代理) この水素化アルミの表面の酸化アルミが5nmぐらいで存在がきちんと分かったというのは、なかなかたいした結果だと思います。ただ、サンプルの中にカーボン等がどれぐらい入っているのか、このサンプルの素性のことがちょっと気になるのですが、そのへんはどうでしょうか。

(高エネ研・大友教授) 自分たちで元素分析までしていないので、確信的な数字ではなくて申し訳ないのですが、前提としては入っていないという前提でやっています。これはもう一度調べます。

(西宮分科会長代理) この実験結果を指針につなげていくということになった場合、例えばサバンナリバーのジダンとかの話の聞きますと、ナトリウムハイドライドで表面を処理するとその表面被膜が壊れてという話をしているわけです。彼はどこまで分析したかは分かりませんが、表面に酸化アルミが存在するということは勝手に仮定して、それは誰が考えてもそういうふうには思うわけです。NaOHで処理するとそれが取れて水素が出てくると、要するにそういうことをプラクティカルにやっている人に対して、分析したらこうだということでも更に何か強いことが言えるとするどんなことが言えるでしょうか。

(高エネ研・大友教授) 実はこの表面の構造解析は α -アルミナがあるかもしれないと言いましたが、ちゃんとした構造解析は出来ません。というのは全部のピークが合わないのです。表面でどういう構造をとっているかということは、アモルファスも混ざっているようなので正直分かりません。しかし、先生がおっしゃったとおり、表面改質を行ったときに、同じ構造があるかどうかは区別出来ると思います。そういう意味で何か改質を行った効果は、これが表面だとすればということになります。比較は出来るのではないかと思います。

(西宮分科会長代理) 分かりました。それは装置的には問題はないのですね、それはやろうと思ったら出来るのですね。

(高エネ研・大友教授) これはまだチャレンジングな状況ではありますが、アルミナがいま5nm程度で2%程度入っているものであれば見えたと思われ。ただ、もっと少ないとか、薄いとか、あるいはそもそもの材料の粒径がもっと大きくて、全体的な表面積がもっと少ない場合などはますますピークとして観測できる強度としては弱くなってしまいますので、ナノ化した表面がたくさんあるようなものであれば出来るのではないかと考えています。

(西宮分科会長代理) 分かりました。

(池田委員) この装置の測定に要する時間はどういう感じでしょうか。例えば 1 サンプルに前処理にどれくらいかかるとか、測定はどれくらいだとか、解析にははどれくらいとか。要は事後評価ですので、過去形はともかくとして、費用対効果という意味で、今後この材料の測定のニーズを十分にこなせるだけの稼働率が見込めるかどうかと意味でコメントをいただければと思います。

(高エネ研・大友教授) やはり解析の内容に少し依存します。これは 60mg のリチウム・アルミ・アミドを 8 時間ぐらい測定しておりますが、おそらくこれはフーリエ変換をするという前提で 8 時間とってありますが、実はフーリエ変換すると運動量遷移量の大きいほう、ここでいうところのばらつきが大きいほうの統計がきくので、もともとシグナルが弱いところの統計精度を上げなければいけないという事情があるので 8 時間とったのですが、リートベルト解析をするためだけであれば分オーダーとか、もっと量がちゃんとあれば秒オーダーで測定出来ます。(P15) それは例えば先ほどの過渡現象の測定のように、これは 8 秒単位でリフレクションパターンをとっていますが、分解することも可能です。ただ単に構造はどう変わっていくか、どれぐらいの時間で変わっていくかということを見るだけであれば、秒オーダーでざっと見ることも出来ます。そういう意味では測定は目的にもよりますが、非常に速く出来ます。速く出来すぎるぐらいに速く出来ます。先ほどのアルミ水素化物のようにひょっとしたら本当は見たくないものだったかもしれないけれども見えてしまう可能性もあります。やはりここからどういうふうに構造解析をするかというのが非常に問題です。もともとアモルファスや欠陥も含め、汚いもの、汚い構造、数式に乗りにくいものをどうやって構造解析するかというのが難しく、難しいものはやはり何日、1 週間とか、誰かが専任でけっこう時間がかかってしまうと思います。リートベルト解析はすぐに出来ます。リートベルト解析に慣れた人であれば日単位ではないかと思えます。

(池田委員) では、当面は測定したいもの、要望があるものはだいたい解析出来るようなローテーションで回せるという理解でよろしいでしょうか。

(高エネ研・大友教授) そうですね、すいません目的によるというしかなくて、リートベルト解析でやれば回ります。ただ、本当に乱れた構造がどういう乱れた構造であるかということに結論を出して下さいと言われると、これはリファレンスの測定も含め、アプローチ自体も考えなければいけない場合があります。つまり持ってきて全部すぐに答えが出るようなところまではまだありません。

(杉本委員) NOVA の全散乱については重水素サンプルですね。水素で同じようなというのは現状では難しいのでしょうか。

(高エネ研・大友教授) それなりにトライはしていますが、やはり反跳効果の補正のようなものがあり、リートベルト解析はうまく出来ていますが、それをフーリエ変換しようと思うと、反跳による歪みなどがうまく引けなくて、それがフーリエ変換に乗っかってきてしまうという問題があります。

(杉本委員) スピンを制御してというのはどうでしょうか。

(高エネ研・大友教授) それは J-PARC 全体のプロジェクトとして偏極中性子を使ったことは考えています。できればサンプルのスピンの揃うといちばんいいと思います。

(杉本委員) 非弾性散乱のお話をうかがいましたが、非弾性散乱のときにいまのようなその場観察的な時間変化というものは見える可能性はありますでしょうか。

(高エネ研・大友教授) 軽水素であればこのエキサイテーションレベルのスピリッティングみたいなものも含め、昔 KEK の池田進さんがやっておられた異方性みたいなものですが、運動量方向に積分しているデータであれば、チタンハイドライドで 10 分で取れました。分単位で出来るかなという感じです。いま、まだ J-PARC が 100kW という加速器のパワーで運転していて、将来 1MW というところを目指していますので、10 倍になれば分オーダーで非弾性が取れるかもしれません。これは 1 日単位とか、2 日単位とかというように時間をかけています。

(笠井委員) 水素の波動関数が見えるというようなことも言われていて、大変面白いと思います。水素一

水素の相関を見て、水素同士がどれぐらい近付いているかというのはもうデータ解析されているのでしょうか。

(高エネ研・大友教授) いまのところは、先ほどのVD2ですが、これは全部のサイトに詰まっているので水素はほとんど動いていないと考えています。(P11) もっと薄いところをやった時に、どこかに水素が集まっていてムラが出来ているとか、そういうものをここから出してみたいと思っています。

(笠井委員) そういう計画ですね。

(高エネ研・大友教授) はい。そして、実は水素ガス雰囲気で行おうと思っているのですが、Vに水素を入れるのが我々の未熟さもあってなかなか入らないという状況があります。それが夏休みまでには解消されれば、秋ぐらいには α 相からこういうデータをシリーズで取っていくということをやりたいと考えています。

(笠井委員) 研究とは関係ないのですが、このプロジェクトでこういう装置、設備の整備をされたということでしょうか。

(高エネ研・大友教授) そうです。

(笠井委員) それに使われていたということですか。

(高エネ研・大友教授) はい。我々のKEKのグループとして水素系の研究を継続しているということです。

(宮崎委員) NOVAの整備が完了して、これから本格的にというイメージだと思います。開発された有望と思われる材料を測定して、材料そのものなのか、吸着させた状態なのか、いまの「雰囲気」というお話もありましたが、評価が出来るのでしょうか。実験的に数字がこうだからこの材料は良いとか、良い材料と思って持って来たものを、それを見て、こう変えたらもっと良いとか、たぶんそういうように開発に寄与するのではないかという気がします。そういうところはどうでしょうか。私はよく理解できていないので教えていただきたいのですが。

(高エネ研・大友教授) 難しい質問ですが、NOVAを使って出来るのは、空間上に原子がどのように配置されていますよという情報が出てきて、それは水素脱離反応であるとか、吸蔵反応の中でどのように構造変化をしていくかということが分かります。ですから、良い材料、悪い材料とって持って来ていただいて、その差を検出することでどういう場合に何が良いのかと、中村さんが言われたようなお話ですが、そういうことを精度良くやっていくことが出来ることなので、良い材料がここかもしれないということを、試料を提供していただいた方に我々がフィードバックして、「いや、そんなはずはない、こういうことが起きているはずだ」というのをまたフィードバックしてという、最終的にはそのやり取りの中で問題点が絞られていくのではないかと考えています。場合によっては、この構造が見えれば良い材料だというようなことはパターン化できるかもしれません。そういう意味で、その構造が見えているかどうか、すぐに見てくれと言われればすぐに見ることが出来ると思います。

(内田分科会長) よろしいでしょうか。ほかにありませんでしょうか。なければ、このあたりで終わりにしたいと思います。はい、どうもありがとうございました。それでは、これから10分間の休憩を取りたいと思います。15時10分からスタートするというにしたいと思います。よろしく願いいたします。

6.5. 水素と材料の相互作用の実験的解明

日原研・町田副主任研究員より資料6-5を用いて説明があり、説明に対して以下の質疑が行われた。

(内田分科会長) ありがとうございます。それではただいまの発表に関しましてご意見をどうぞ。

(西宮分科会長代理) 質問がいっぱいあるので簡単に答えてほしいのですが、例えば 16 ページですが、 NiLi_5 はすごい研究成果だと思います。こういうすごいものとそうじゃないのが混じっているのがすごく気になります。つまりこの図の右側にある MgH_2 の水素放出温度が下がったというのですが、 MgH_2 の水素放出温度はもともと 560K くらいですから、だいたい 680 あたりにプロットしてあるのが、そもそもその図がおかしいですね。

(日原研・町田副主任研究員) これは、ケルビンで……。

(西宮分科会長代理) だって平衡圧が 1 気圧になるのは 284°C ですよ。だから 560K くらいで出なければいけないので、その図はおかしいです。だから、すごい研究成果とこういうのが混じっているのはすごく問題だと思います。

(日原研・町田副主任研究員) 縦軸に関しては再度確認したいと思います。

(西宮分科会長代理) 質問ですが、指針のほうですが、指針の 1 番に Al に何か混ぜるといのが必要だ、こういうふうに書かれるのは、これもあまり良くないと私は思います。今日の研究発表を聞きますと、Ga のような融点の低いものを混ぜると良いとか、あるいは Ti のように原子半径が同じものを混ぜるのが良いとか、どうしてそういうふうに書かないのでしょうか。

(日原研・町田副主任研究員) Ga の件と Ti の件とこちらの説明が混同させてしまっていますが、Ga の添加に関しましては、水素化の反応を促進させる、水素の収率を上げるということで添加をしています。基本的に出来ているものは、この白いものは AlH_3 だと考えています。こちらの Al と Ga の合金の水素化物ではないと思います。

(西宮分科会長代理) そういうことを言っているのではなくて、こういうふうな指針の書き方をすると、何かを混ぜれば良いと言っているだけに見えてしまう。そうではなくて、融点の低い金属を混ぜるのが良いとか、あるいは原子半径がこういうのが良いとか、そういうふうに具体的に言わないと指針とはいえないと思いますが。

(日原研・町田副主任研究員) まさにそのとおりだと思います。それは私の記載の仕方がまずかったということで、申し訳ありません。

(西宮分科会長代理) そうするといまのところタイプが 2 つ、原子半径の話と融点の話と。3 点目の、Mg がどうして良いかということになると、Mg-Al 系というのはこれまですごい研究がありますが、ほとんど Mg 側から研究していますね。水素が入ったら分相するということも分かっているわけですが、この Al を主体にして Mg を入れるというのは、従来の研究とはどこが違いますか。

(日原研・町田副主任研究員) 1 つの考え方としましては、Mg 添加に関して観測されている合金化による融点の低下以外の効果としまして、 AlH_3 の中のアルミを他金属で置換して同じような結合状態をもつもの、すなわち AlH_3 中でアルミと水素の結合状態と同じような結合状態をもつアルミ合金、これがマグネシウムに相当するかどうかは分かりませんが、そういったものが出来ればさらに AlH_3 の性能向上につながるのではないかとということと、あとは AlH_3 とは全く異なる結晶構造をもつような、侵入型に近いような材料を合成するということがあります。マグネシウムに関して多数の研究があるというのは存じておりますが、まだ Al と Mg の研究というのはそれほど実際のところ進んでおりません。

(西宮分科会長代理) 例えば Al に関して水素を吸う金属を混ぜる、例えばアルミチタン水素化物もそうですよね。だけれども、原子半径が同じだったら分相せずに水素が入るとかいう話だったら分かるわけです。せっかくすごい知見が出ているわけですから、もう一味、二味つけてほしいというのが私の希望です。あと 2 つ質問があるのですが、例えば先ほど AlH_3 で共有結合だとおっしゃいました。その結合は、例えばカーボンと H の共有結合に比べるとどう強いですか、どう弱いですか。

(日原研・町田副主任研究員) 実験結果からだけでは結合の強弱に関しては定量的なことはいえないので、

現在計算のほうとも合せた研究は進めています。具体的な数字は忘れてしまっていて言えないのですけれども。

(西宮分科会長代理) 最後にもう1点、Euのことですが、このEuについて、PLがたまたま若いころにされていた研究を思い出しました。テーラー (Brian Taylor) 博士のEuNi₅で、当時Euは水素が入ったときに3価だと言われていたわけです。いまここでEuが2価で、ある条件で3価になるというのは、EuNi₅で比べるとすごくおもしろい話ですけども、ただ、これが分かっていったい次にどんなことが出来るかというところが若干気になるのですが。

(日原研・町田副主任研究員) 少なくともEu単体での話ですと、2までしか水素量が入らなかった、その原因としてはEuが2価であるからということが実験的に示されたわけです。これが高圧下におきましてEu自体も3価が一般的で、3価になりますと水素量が増える。それで、他の希土類と同じように3価であればEuも2以上、極端に言えば3まで入る条件は整う。ですので、そういった価数の制御とといったものも少しちゃんと突き詰めていく必要があるのではないかと考えています。

(西宮分科会長代理) 1歩進んで言うと、EuNi₅が昔からH6点いくつまで入っていたというのは、それがたまたま3価になる条件だったからだということが今回分かったということになりますね。

(日原研・町田副主任研究員) ユーロピウムニッケルに関して不勉強で存じあげなかったのですが、先ほどの話を聞いている限りではそういうことだと、その条件ではおそらくユーロピウムは3価ないしは3価に近い状態になっていたと考えます。

(西宮分科会長代理) はい、けっこうです。

(産総研・秋葉客員研究員) 思い出させていただいてありがとうございました。16ページの右側の図でございますが、これは西宮先生のおっしゃっているとおりなのですが、これは比較のためにすべて水素雰囲気中のDSCで同じ条件で比べたという、そのデータです。ですので、水素圧が0.5気圧あって、そこでDSCで速度論的に見えていますので、そういうかたちで速度論的なものと平衡を両方ごちゃごちゃにしているのではないかというふうなご指摘はあるかと思いますが、サンプル量が少ないものですから同じ条件で比較しております。そのあたり、誤解を受けるような表現でまことに申し訳なかったと思います。

(井上委員) 先ほどEuの件で2価から3価になったというのはどうしてなのでしょう。超高压になると2価から3価に価数が変わるというのは。

(日原研・町田副主任研究員) 単体のEuもそうですが、Eu₃価のほうが、簡単に言ってしまうとイオン半径が小さくなりますので、圧縮によって3価のほうが、大きいよりも小さいほうが安定化するというのがいちばん簡単な説明かと思います。

(井上委員) 化学的に考えると酸化されると何か還元されるということを思うのですが、高圧下になって水素自身が例えば不均化するとか、そういうふうなことはないのですか。

(日原研・町田副主任研究員) 水素自身が不均化したかどうかは分かりませんが、水素自身が不均化というのはこの中で水素が例えばプロトンとHマイナスになっているとか、そういったことを意味されているのかどうか、ちょっと分からないのですが、基本的には水素は不均化していないのではないかと思います。

(井上委員) 3価になるということに意味があるのだとしたら、別の方法でもする方法はあるのではないかと思うのですが、高圧下でこういうふうなことになったというのに価値があるというのだとしたら、なぜかというところをもう少しはっきりしたほうが良いという気がしたのですが。

(日原研・町田副主任研究員) まずは、もともとユーロピウム水素化物、ただ単に結晶学的に、結晶学的にというのは合っているかどうか分かりませんが、非占有サイトをもっている物質です。結晶構造は違いますが他の希土類はH/M=3までいくのにEuはH/M=2までしか入らないという問題がありました。

た。Eu は水素が入っていない状態でもそうですが、先ほども言ったとおり、Eu を高圧下に置きますと価数転移が起きまして 2 価から 3 価になるということを、過去の研究からしたいという。ですので、我々の考え方としましては、高圧水素中で圧縮することによりまして、3 価の状態を作れば、より水素が入れるであろうということを考えています。

(井上委員) 分かりました。この場合に水素はハイドライドですか。

(日原研・町田副主任研究員) はい。

(井上委員) ありがとうございます。

(内田分科会長) 他にいかがでしょうか。

(杉本委員) アルミの水素化反応と水素化過程の解明というところですが (P8)、合金化してアルミ合金のクラスターみたいなものが出来ていて、その間を水素が透過して行って、アルミ基合金のほうへ入っていくという、そういう意味ですね。

(日原研・町田副主任研究員) そうです。水素化した高濃度圧力条件におきましては、Ga が溶融しておりまして、Ga の溶けた海の中に Al 合金と書いておりますけど、基本的にはその Al が水素化していく。

(杉本委員) アルミのサイズはどのくらいですか。

(日原研・町田副主任研究員) サイズまでは何ともいえませんが、少なくともかなり小さいものだと思います。

(杉本委員) クラスターでサイズ効果みたいなものがこういう現象に効いているかどうかをうかがいたかったのですが、それはあまり関係ないということですか。

(日原研・町田副主任研究員) もちろんサイズが大きければアルミニウム自身が水素化を阻害しますので、出来る水素化物の収量としては減る方向にいくと考えています。今日ご紹介いたしませんでしたが、アルミニウム単体が水素化する際には自己微細化現象が観測されています。これは高温高圧下におきまして水素化する前にいったん結晶が小さくなりまして水素化が起こるとい現象です。その時、X 線の回折パターンで見ている、アルミニウム自体が成長してスポットになった。そのスポットがいったん壊れてという変ですけど、リング状になって水素化物を形成するというふうな過程を経るということが分かっています。

(笠井委員) 成果の発表ですが、日本の英文雑誌にはそれなりに投稿されていますか。これを見ると外国の方が多いのですが、それが気になって。

(日原研・町田副主任研究員) 日本の英文雑誌のほうにも、Material Transaction などには投稿しております。

(笠井委員) あと特許の出願に関して全体的なことではちょっと気になったのですが、国内の出願はありましたけれども、国際的な出願が見当たらなかったのですが、この研究に対してというわけではないのですが、全体として気になりましたので、そのあたりどういう意図かということを知りたいと思います。それから、価数の変化と構造の変化のところですが、それはこのような実験ではどのくらいのサイズのところからそれが見えるのですか。時間的にそれが変わっていくところが見えるのですか。時間的に変わっていくわけですね、プレッシャーをかけて徐々に変わっていくのですか。

(日原研・町田副主任研究員) ある圧力になって、その圧力が安定してから測定していますので、どのくらいの時間で変わっていくかというのは、現在はそういった測定はしていません。

(笠井委員) やらうと思えば出来ますか。

(日原研・町田副主任研究員) 価数の変化に関してはメスバウアー分光の測定時間の関係上、難しいところがあるかと思います。

(笠井委員) ちょっとしんどいね、分かりました。

(内田分科会長) そろそろ時間がまいりましたが。

(産総研・秋葉客員研究員) いま笠井先生からの特許の件ですが、いま私は九大におりますが以前産総研にいた時は、独法化以降はご存じのように特許出願に関して、それまで通産省、経済産業省の一部でしたものですから、特許出願に費用は一切かからなかったところ、今は独法になっておそらく国立大学もみなそうだと思いますが、中で非常にシビアな査定がありまして、ですから実際には15年かそこいらくらいのあいだで回収出来るようなものについて厳密にやっているというのが実情で、その中を非常に厳しい審査を乗り越えて、これだけの数とにかく特許を出させてもらったというのが正直な実態ではないかと思います。申し訳ないですが、そういうところかと思えます。

(内田分科会長) ありがとうございます。それでは時間もまいりましたので次の発表に移りたいと思います。

6.6. 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

産総研 小川主任研究員より資料6-6を用いて説明があり、説明に対して以下の質疑が行われた。

(内田分科会長) ありがとうございます。それではただいまのご発表に関しましてご質問、ご意見をお願いします。

(笠井委員) 炭素系の材料で白金をつけた話ですが、白金をつける量はどのくらいですか。

(産総研・小川主任研究員) ご紹介したのは直径が1~3nm くらいの微粒子を、2.3wt%の条件でつけた図です。

(笠井委員) 白金をつけるとけっこう重たくなってしまうので。

(産総研・小川主任研究員) それを含めての重量パーセントですから。

(笠井委員) 分子軌道法計算に白金は入れていますか。

(産総研・小川主任研究員) それは計算に入れていなかったです。

(笠井委員) それをやるとけっこう小さくなってしまいますので、プラチナのサイズがどこまで絞れるかというのもけっこうターゲットとしてあるなと思います。

(産総研・小川主任研究員) 口頭で申し上げた、白金の錯体を熱処理したというのでは、おそらく1ナノか1ナノ以下くらいになっているのではないかと予測しています。

(笠井委員) それからこういう実験のことですが、吸着量はどうやって測るのですか。重さですか。

(産総研・小川主任研究員) プロフェッショナルが実は後にいますので、頼ってしまってよろしいでしょうか。

(笠井委員) いいですよ。どういうふうに測りますか。

(日産自動車・伊藤) 水素吸蔵合金のJISにしたがって、圧力の減少を測定しています。

(笠井委員) 圧力の減少でみるわけですか、重さではなく。

(日産自動車・伊藤) 水素貯蔵材料の重量をまず測ります。材料の入っていない容器と入っている容器の水素吸蔵により減少した圧力分から重量辺りの水素吸蔵量を算出しています。方法としてはJISの7201に従っています。

(笠井委員) 私も自動車メーカーさんと共同研究をしたことがあって、目方を測る方法が一番精度は良いという話を聞いて、やってもらったことがあります。それから、吸着して、結局とれなかった水素というのはあるのですか。

(日産自動車・伊藤) ZTC でしょうか。

(笠井委員) はい。

(日産自動車・伊藤) いまは微粒子とか錯体でやっていますので、減圧すれば水素はとれます。大きめの

微粒子の時はとれにくかったです。それは白金についているという部分もあると思うのですが、減圧しながら昇温すると最終的には取れました。

(笠井委員) そうでしょうね、そのあたり難しいところもちょっと。

(日産自動車・伊藤) 昇温したらとれたというのが何を意味するかというのが完全には分かっておりません。(注釈：昇温したら取れますが、金属微粒子を担持すると現象が複雑になるので、まだ放出の挙動は完全には分かっておりません。)

(笠井委員) 分かりました。

(池田委員) 資料9 ページの見方を教えていただきたいのですが、上のほうに吸蔵量が最大 20 倍増大とありますが、これはどういう計算で 20 倍になるのでしょうか。

(産総研・小川主任研究員) これはだいぶ初期のころの数字でいろいろな誤差が入っていると思うのですが、低圧側で白金に吸着する部分もおそらく含まれていると思うのですが、白金を入れない時の吸着量に対して非常に上がっている部分、その最大が 20 倍であったということです。高圧になるにしたがってその差が縮まってしまうと、あるところで実は逆転するのです。それはいろいろなことをやると比表面積が下がってしまうということが主な原因でして、スピルオーバー部分は確実に増えています。ただ、本来物理吸着で吸っているところがおそらく減っているのですね。だから少しパーターしている部分があって、20 倍というのは本当に理想的なアピールするための数字です。

(池田委員) このグラフを見ると、圧力が高いところは 2 倍で、下がっていくとだんだん 20 倍に近づいて、低い圧力だともっと 50 倍とかになるので、この表現の仕方があまり科学的ではないのではないかという気がするのです。

(産総研・小川主任研究員) これはどちらかというと出来るかどうかをアピールするための図です。1 回目は普通に吸わせて、2 回目は温度を上げずに……。

(池田委員) 20 倍と示すときに実験条件を書き加えられたほうが良いのではないかという気がします。

(産総研・小川主任研究員) はい。ありがとうございます。

(西宮分科会長代理) 私も池田さんと全く同感で、つまり 2.2%と言っていたものが、20 倍といたら、40%いったのかと思うわけですから、そこはやはり気をつけてください。今後は 5%くらいがほしい相場だと思いますけれども。あと、ZTC の曲率が効いているというのはとてもおもしろい話だと思います。私は計算の詳細は分かりませんが、実際の実験結果、例えばカーボンナノチューブとかフラーレンとかはたいしたことない、それは曲率があるけれども外側だからだめだという話になるわけですよね、きっと。もし内側が良いとすればそれを実験的にやってほしい。これはここで言う話ではないかもしれませんが、もし内側が良いのであれば、例えばこの ZTC はたぶん Y 型ゼオライトでやっていると思うのですが、Y 型じゃなくてもゼオライトなんかいくらでも種類がありますからどんどん変えたら曲率を変えるのはいくらでも出来るはずですね。先ほど曲率を変えられないとおっしゃいましたが、そんなことはないですよ。それはどうしてその実験結果がないのですか。

(産総研・小川主任研究員) 私がもっていないという意味です。もちろん東北大の先生は百も承知でいろいろ出されていると思います。計算したものと整合する部分でやりとりしています。

(西宮分科会長代理) それと計算結果が合うのかということをお答え下さい。

(産総研・小川主任研究員) 合うかどうかですか、難しいですね。計算の実態を分かっておりますので、計算が何をやっているか分からないというご質問でしたので、それにお答えして代えたいと思いますが。

(西宮分科会長代理) それは別に要らないです。つまり湾曲が効いているとおっしゃいましたが、この図のときにはダングリングボンドという言葉が登場したし、それから sp³ という言葉が登場したことを記憶しています。それでしたらむしろ欠陥というふうに言うべきではないかと思うのですが、湾曲よ

りも。というよりも、一番知りたいのは湾曲を変えたものを実験的に作ってデータがどうなったかということを知りたいです。

(産総研・小川主任研究員) 私はあのデータしか持っていないので、委託先に直接お願いします。

(東北大学・京谷教授) 東北大学の京谷です。あの実験データは実測値です。湾曲を変えました、実験的に。それはあのカーボンを一方向に押したわけです。そうすると湾曲が変わって、そうなると、水素ではないのですが CO₂ の吸着量はちゃんと増えました。湾曲を変えると増える。湾曲というのは結局曲率半径なのです。つまり曲率半径を変えると吸着量が変わります。

(西宮分科会長代理) はい、それは結構ですが、水素はどうなのでしょう。

(東北大学・京谷教授) 水素の高圧のこの実験は難しく、常圧までやったら少し増えました、やはり。

(笠井委員) 水素は解離吸着しないといけないからそう簡単にはいかない。CO₂ とか CO はつくでしょうけど。

(東北大学・京谷教授) CO₂ は非常に簡単ですが、水素はたくさん使用量が必要なので、非常に実験的に難しく、少し増えたというのは見えました。

(西宮分科会長代理) いちばん基本的なことで伺いますが、水素がくっついたときのくっつき方が、この計算結果だと相当共有結合に近いような感じだと思うのですが、例えば赤外で CH 結合は見えるのでしょうか。

(産総研・小川主任研究員) けっこう難しいと聞いています。

(西宮分科会長代理) それは in-situ の測定が出来ないということですか。

(東北大学・京谷教授) これはスピルオーバーの計算結果ではそうですが、実際にはあんなにきつい結合で着いているとは思えなくて、共有結合ではなくて非常に物理吸着に近い結合だと思っています。そうでないと単に減圧にただけでとれてこないですからね。

(西宮分科会長代理) 物理吸着ということになると、1 桁キロジュール/モルでなければいけないので、相当桁が違う話になりますが、それでいいのですか。

(東北大学・京谷教授) 分子軌道計算の精度が絶対値的にどれだけ変わるかどうかという話になってきますね。だからこれは傾向をあらわしていると私たちは考えております。

(産総研・小川主任研究員) 私の予測では、外側の部分はやはり sp³ 的になるので強いのだと思います。ただ、それが内側もありますし、エッジもありますし、そのほうにうまく着いているものが、いま実験的に吸放出で見えている。外側に sp³ 的のがっちり着いたものはおそらく出てこなくなっているのではないかと想像しています。

(笠井委員) 計算される時に炭素の動きも一緒に入れてやる、実はそんなにとれにくいことではなくて、でこぼこにして sp² か sp³ にしておいて、それで結合の手を作って水素を着けて強い結合を作るけれども、それが上手に元の構造に直すようなそういうモードも入れてシミュレーションしたら、引きはがすのに必要なエネルギーがそれほど大きくはなりません。ということをやられたらいいと思います。

(産総研・小川主任研究員) ありがとうございます。

(内田分科会長) 他にいかがでしょうか。

(井上委員) スピルオーバーで実際に白金のところからカーボン上を動くというのはどのくらい動くことになるのですか。

(産総研・小川主任研究員) 量ですか。

(井上委員) 距離ですね。

(産総研・小川主任研究員) それは全然分からないですね。構造的に言いますと、詳しく申し上げませんが、要するにゼオライトのポアの部分に多少加わって、次のポアにいくまでにちょっと細いところがある。一番良いのはどこでもいいから白金をつけるとどんどん細いところもたどって行ってく

つつくのが理想なのですが、吸着量的にはむちゃくちゃいっぱい着いているわけではないので、白金はどう考えても全面に着いているわけではないので、まだそこまで、遠くまでいっていますとは言い切れないと思います。

(井上委員) 白金量と分散度は影響するのではないかと思うのですが。

(産総研・小川主任研究員) イメージ的には(白金添加 ZTC の TEM を示して) こんな感じですね。長さが(TEM 写真中のスケールを示して) こういうわけで、ちょこちょこ見えているのがちょうど小さなユニットです。

(井上委員) 白金もその(写真に写っている) くらいの密度で着いている。

(産総研・小川主任研究員) そう考えています。

(井上委員) ありがとうございます。

(宮崎委員) クラスレート水合物のところに、ヘルプガスがプロパンと、私どもプロパンもやっているのに興味があるのですが、これは、要はヘルプガスとしていろいろなものが当然あるのでしょうか。これに対してどういうものが良いということでプロパンになっているのでしょうか。

(産総研・小川主任研究員) これは東北大学の研究ですが、いろいろやっていると聞いています。THF をやっている研究者が多くて、それだと 0°C くらいまでいくという研究結果もあるということですが、東北大の発想は、THF だと少し大きすぎて、しかも量が必要なので水素が入る分が減ってしまうということで、多少他の特性を犠牲にしてもいいから、この構造、これは 3 次元的に無限につながっている構造の基本部分だけお見せしていますが、何か構造を支える部分を数か所まばらに入れて、他の空洞を何とか保持しながらそこに水素を入れてやる。メタン、エタン、プロパンと順番にいろいろやった結果、プロパンは多少大きめですが THF より小さくて、それでマイナス 30°C くらいで、もちろん量と圧力の関係はありますけれども、いちばんよさそうなところがそこであったと聞いています。ですからあまり小さいと支える能力がない、あまり大きすぎると水素の場所をとってしまう、そういう関係です。

(宮崎委員) それは検証ですか、計算ですか。

(産総研・小川主任研究員) 計算です。

(宮崎委員) 先ほどおっしゃったように実証もやってみたい。

(産総研・小川主任研究員) 実証をやりたいと考えています。

(宮崎委員) ここに書いてある、100 気圧でマイナス 30°C というのが、いわゆる保持状態で安定すると、そういう意味合いでよろしいのですか。

(産総研・小川主任研究員) そうです。

(宮崎委員) そこから作動させるときは温度圧力を、温度だったら上げる、そういう意味合いでよろしいのですか。

(産総研・小川主任研究員) そうです。圧力だったら下げる。

(宮崎委員) 1 つだけ疑問というか、後のところの成果の意義で、寒冷地向けの実用化へというのがあるのですが、あまりそんな大きな意味合いはないのではないかと思うのですが、それはやはり温度が低いから、そういう意味合いですか。保持が少しでも楽だからという。

(産総研・小川主任研究員) 応用を強調するときは何にしようかと思って、マイナス 30°C でいいということころは寒冷地かなと、非常に単純な発想です。定置型とかいろいろ別な用途もあるかもしれませんが、分かりやすいという意味です。

(宮崎委員) 本当の実用化だとたぶんもう少し、いわゆるエンジニアリングの仕組みでそういう形をとらないと、いずれにしても寒冷地だからいいよということにはならないと思いますが。

(産総研・小川主任研究員) もちろんそうだと思います。ありがとうございます。

- (西宮分科会長代理) いまの質問に関係があるのですが、THFを使った実験はオランダのほうですごく詳しい結果があると思うのです。状態図も出来ていますよね。私計算の詳細が分からないのですが、計算をやって例えばそういう状態図が再現出来るのかという点はどうでしょうか。
- (産総研・小川主任研究員) 我々がやっているのはとにかく予測なので、状態図を書くほどではない話です。信頼出来るかどうかは、再現出来ているかどうかとしか言いようがないので。
- (西宮分科会長代理) それでは提案にならないと思うわけです。例えばTHFだったら安定に入ることが計算結果で出た、だとするとみんなこのプロパンの結果を信用して、じゃあやろうということになるのではないですか。
- (産総研・小川主任研究員) そういう意味では量を一定にして、温度、圧力を変えて計算しろということですね。
- (西宮分科会長代理) 違います。THFで計算して、THFだったら、確かにこの条件だったら水素がちゃんと入るということ、計算で出来ますというふうに言ってくれなければ、使う気になれない。
- (産総研・小川主任研究員) そういう論文があるのは知っています。
- (西宮分科会長代理) 小川さん自身が、小川さんの計算コードでそれが出来ますかということです。
- (産総研・小川主任研究員) 私は持っていませんが、東北大は、状態図が書けるかどうかは分かりませんが。
- (西宮分科会長代理) 状態図は取上げて、1点でいいです。THFと水と水素の三元系で安定な状態が出来るということを計算で出すということがまず必要だと思います。
- (産総研・小川主任研究員) そういう図にしたつもりなのですが。
- (西宮分科会長代理) これはプロパンではありませんか。THFではないと思います。
- (産総研・小川主任研究員) THFはやっていないと思います。
- (西宮分科会長代理) だから、THFはすでに詳細にやられているわけですから、それを計算でやりました、それはスタートラインですが、そのスタートラインが確認出来ていますかということを行っているわけです。
- (産総研・小川主任研究員) そこまで確認してないです。自分でコードを書いてやっていると聞いていて、メタン、エタン、プロパンといろいろと変えている、その中でTHFで検証しているかどうかは分かりません。
- (内田分科会長) 最後に1つだけ質問させていただきたいのですが、15ページの最後のページですが、知的財産に関する戦略はどんな戦略か簡単に教えてください。
- (産総研・小川主任研究員) ネガティブなことを書いて削っているのですが、実験系はもちろん東北大多元研でどんどんZTCに関する特許を出願しております。ただ計算については、今のような議論もありますので、特許が取れるかどうか非常に問題になります。ですから検証して実験で出来たところで特許を書くというのが普通の例だと思うのです。私自身は1件だけ特許を書いたことがありますが、それはソフトウェア特許で、けっこうリエゾンマンの方もよく分からない感じでやっただけで、計算で特許を書くという文化はあまり浸透していないので、実のところあまり戦略はありません。
- (笠井委員) 私は計算屋ですが、私らは特許を出します。実験がナノテクノロジーの時代に入って実験するのが難しいから、計算でも特許を取るという、そういう姿勢が必要で、それは私特許庁の審査官とも何度も論争をやっています。うまく行って成立したものもありますし、最後までだめだと言われたものもあります。そうやっていかないと、国際的にはアメリカで出したらほとんど認められます。NEDOのプロジェクトで出した特許もアメリカでは5年も6年も前に特許化出来ているのに、日本ではいまごろ論争になって、拒絶査定が出て、最後審判にいて、やっぱりこれは認めるという裁定が下るわけです。そういうことがありますので、我々がしっかりやらないと、いつまでたってもだめで

すので、ぜひチャレンジしていただきたいと思います。

(内田分科会長) 時間もまいりましたので、どうもありがとうございました。

(非公開セッション)

非公開資料取扱説明

7. 実用化の見通し

(非公開のため省略)

(公開セッション)

8. 全体を通しての質疑

(内田分科会長) それでは、これまでおうかがいしたプロジェクト全般についてご意見、ご質問等ございましたらお願いいたします。また、先ほどの非公開セッションの内容に関してはこの場では触れないようにお願いいたします。

(笠井委員) やはり特許出願はもっと積極的にできたと思います。実際に先ほどおっしゃったように特許出願するのが難しくなっているのは事実ですが、それはそれでオーバーカムしていけばいいのだと思います。我々もそれは努力していますし、国際特許出願もそれなりにいろいろ支援をいただきながら、やれるレベルのものにもっていけばそれでいいと思うので、このプロジェクトもそういうところは努力されたいのではないかと思います。

(産総研・秋葉客員研究員) ありがとうございました。

(内田分科会長) 他にいかがでしょうか。全体を振り返ってみてよろしいでしょうか。もしなければここで審議を終了したいと思います。またお気づきの点がございましたら後日でもけっこうですので質問票にて意見を事務局までお寄せください。

9. まとめ・講評

(内田分科会長) 一応審議も終了いたしましたので各委員の皆さまから講評をいただきたいと思います。それでは宮崎委員から一言、講評ということでお願いしたいと思います。

(宮崎委員) きょうはお疲れさまでございました。講評というよりは、私もいろいろと勉強させていただいて本当にどうもありがとうございました。このプロジェクトは実験からの提案とか計算からの提案、吸着材料の構造、水素の吸蔵状態やその解析、金属材料、非金属材料、いろいろな観点から、かなり多岐にわたり、それらがまとまってFCV用の自動車の水素貯蔵材料の開発ということがメインになると思いますが、我々としても非常に関係の深いところにおりますので非常に期待しております。もう1つ、最終目標は2025年から2030年くらいということでもう少し時間があるわけですが、来年度から次のステップのプロジェクトが始まると思います。次のプロジェクトのところで、25年、30年の最終目標はそれにかまわないと思いますが、その過程というかその中で、最初に私が申し上げさせていただいたように他の用途とかそういうものも含めて、自動車用では難しいけれどもこういうものであれば可能だとか、そういうような展開もぜひ、プロジェクトの方向の中に入れていただければ我々としてもありがたいと思っております。以上でございます。どうもありがとうございました。

(内田分科会長) ありがとうございました。笠井委員お願いします。

(笠井委員) 私もきょうは1日大変勉強になりました。こういう大型のプロジェクトの難しさというのが、私もこういうものは初めてで、大型の設備の導入というか、地震の影響もあったので普通のセンスという成果とは違うかたちの、これからやれるぞというものを見て、これからのエクスペクテーション

(期待値) で、ああこれは成果なのだという評価もする必要があります。評価する側もちょっと考えなければいけないのではないかという印象をもちました。これから次のステップもあるとうかがっておりますので、それに対して反映されることを期待したいと思っております。どうもありがとうございました。

(内田分科会長) ありがとうございます。井上委員お願いします。

(井上委員) 私も1日有意義な時間を過ごさせていただきました。最初にご質問して秋葉先生からお答えがありましたけれども、この事業自体は数値目標もなしに、そして目標値というものも度外視したようなかたちで純粋な基礎研究をするということでしたので、やはりいい結果が出ている分につきましては今後を見通すという意味でも、やられた結果の中でも、今後の期待もこめて結果に対してめりはりをつけていただけたらいいなと思いました。あともう1つ、業績の件で論文も質のいいところにたくさん出ていると思いますが、基礎的な研究で非常にすばらしい結果が出ているということでしたら、例えば **Nature** や **Science** に投稿されたらと、個人的に思いました。以上です。

(内田分科会長) ありがとうございます。池田委員お願いします。

(池田委員) 2つほどコメントさせていただきます。先ほどから委員の皆さんからも出ておりますが、この技術は世界に誇れる戦略技術としてこれからも日本が世界をリードしていかなければいけないと思います。ぜひ知財のほうを産学官で知恵を出し合って守っていくことが必要だと感じました。それからこのあとロードマップ等々の議論がされて、次の実用化に向けたプロジェクトもスタートしていくと思いますが、次は開発の前提条件等をもう少し具体的にして、より出口が明確なプロジェクトとして設定して取り組んでいただければと感じました。以上です。

(内田分科会長) ありがとうございます。西宮先生。

(西宮分科会長代理) 少し長くなるかもしれませんが、基礎研究から指針が出るということが本当にあり得るのかと思っていたのですが、いくつかそれが出てきて、たいしたものだと思います。順番に言いますと、例えば合金で、きょう質問しましたが **A2B4** セルがいいというのはなかなかいい、これが本当に特許になればいいなと思います。ただ、マグネシウム、ニッケルでやっても5%ということになると、ちょっと残念かなと思います。つまり、**Mg₂NiH₄** よりもちょっと高いくらいなので、もうちょっとびっくりするくらい設計が出来るといいなと思いました。それからナノ複合化のところはなかなか他の人が追随出来るような実験ではなくて、特に低温でナノ複合化するとおっしゃっていましたが、これを企業とかもっと大規模に出来るようなところに展開して、それで水素化アルミとか、アンモニアボランとか、**DOE** とは違う路線でこれがどんどん出来るとすごいことになると思いましたが、多分、やるのがいっぱいあって、安全についても相当大変な研究がこれからあると思いますが、これは力を入れてやって欲しいと思います。それから中性子でナノ化の方向で表面が多いものだったら見える可能性があるとおっしゃったのがとても印象的でした。それは本当に大事なことで、たぶん日本がいちばん進んでいると思うので、マシンタイムをどんどん開放して、材料屋さんがそれを駆使して、いい材料が出来るのを支援して欲しいと思いました。それから材料物性のところですが、やはり **NiLi₅** はすごいと思います。実際これが特許出願したかどうかをあとで答えてほしいと思いますが、従来は超高压を使わないとこんなものが出来るとだれも思っていなかったものが出来たというのはすごいことだと思います。アルミニウムに何を混ぜるかという指針も今日ありましたけれども、それをもう少し定量的に言っていただくのと、それからマグネシウムでも超高压でこんなことが出来そうだというようなことをこれからどんどん言ってほしいと思います。それから計算の話、専門ではなくよく分からないところがありますが、今日も質問しましたように **ZTC** とかクラスレートとか、要するに現実のデータはこんなことからなると計算で再現出来るというところをまず押さえて、ここから先はこういうことが提案出来るというように二ステップでやってほしい。多くの人は計算で何をやって

いるのか全然分かりませんので、計算の信頼性をまず確認してから次へ行ってほしいなと思いました。以上です。

(内田分科会長) ありがとうございます。では最後に私のほうから感想を述べさせていただきます。私実は水素化物の研究を始めたのは1973年頃だったと思います。今日お話を聞きながら、ずっと過去のことを思い出しながら非常にいろいろなことを思い出していました。私が始めたのは希土類、水素系の状態図であったり、タンタル、ニオブ、バナジウム水素系の状態図作成であったり、そんなところから手をつけたわけではありますが、ちょうど74年に日本はサンシャイン計画でかなり水素の分野も加速されて、これから水素だと言っていたのですが意外とその後の伸びが悪くて下火になりましたね。そのころそれでも、例えば水素貯蔵合金の特性評価の標準化、JIS化などということでは日本国内で世界に先駆けて標準化作業が行われていたわけです。その後ニッケル水素電池が出てきて、ここでまた少し水素に関して皆さんの興味がわいてきて、そこで持ち返してきたわけですが、やっとならば燃料電池というところでまた水素に目がいつているわけでごさいます。そんな中で、私は基本的には早く水素吸蔵材料というものがニッケル水素のようによく商品化して、さらにまた発展するといいなと思っています。そういう意味ではモビリティと定置型、例えば海外はドイツを中心に、アメリカもそうですが燃料電池自動車のほうに集中してかなり動きが激しいわけですね。日本がここでまさに戦っている状況でもあります。一方、日本が進んでいるのは定置型の燃料電池、これはかなり今進んでいる状況だと私は認識しております。家庭用の小型のものです。こういうことを考えると今後インフラを相当整備していかなければいけないということがあって、となってくると、モビリティとかそういうことだけでなく、水素ステーションも始めて、液体水素をどう扱っていくか、そういうところにももっともっと水素吸蔵材料が利用されているのではないかという気がしています。そんな意味ではぜひこういうプロジェクトに関係された皆さま方も、少し広い視野をもって、もっとこんなことに使えるのではないだろうかということやぜひ積極的にトライしていただけたらいいのかなと思いました。と言いますのも、私も過去30年、40年を振り返ってみて基礎研究にこれだけ集中された研究成果というのを今日これだけ纏めて聞いたわけで、多分、世界にもこんなケースはないのではないかと考えています。そういう意味ではぜひこれを基にして、今後さらに発展させていただきたいという気持ちが非常に強くなりました。特にこれからこういう手法が使えますよというのは、SPring-8だったり、大型施設のJ-PARCの利用開発だったり、だいぶ出てきていますので、こういうことを糧に、さらにこんどは産業界をもう少し明確に巻き込んで、ここからどうしたらいいのかということをもう少し表に出されて進まれたら非常に良いという気がしております。成果だけ見ると論文、アカデミックアチーブメントという意味では非常に優秀だと思いますし、また人材育成という面でもこういうプロジェクトはとても大事だったと思います。その部分でも成果があったと思います。ですから、むしろ今後の課題というか今後の方向性をもう少しここで明確にして次のステップに行かれたらいいという気がいたしました。以上でございます。それでは他に追加のご意見がある先生いらっしゃいますか。

(NEDO・橋本部長) NEDOの新エネ部長の橋本でございます。本日はたくさんの忌憚のないご意見やコメント、ご指摘をいただきまして大変ありがとうございます。冒頭申し上げましたとおり、このプロジェクトの評価というのは、終わったことに○×をつけるというよりは、ここからいかに教訓を引っ張りだして次につなげていくかということにこそ意義があるのだと思っておりますので、我々といったしましても、いただいたご意見を踏まえて次につなげていく、それをどうやっていくのか、そういったところに注力していきたいと思っております。

(内田分科会長) どうもありがとうございました。出来ればプロジェクトリーダーからも一言お願いします。

(産総研・秋葉客員研究員) 今年の2月でこのプロジェクトは終わったわけですが、先ほど井上先生がお

っしやったように、当初は毎年 Nature、Science に1報づつくらい出そうという意気込みで始めたプロジェクトでございまして、ご指摘のように必ずしもそこにはいけなかったのですが、Physical Review Letters にたくさん出すとか、その次のレベルでは相当出してきたということで、私としては基礎研究の面ではかなりの成果が上がったと思っています。また、NOVA という装置を大友先生はじめ、高エネルギー加速器研究機構の皆さまの大変な努力で、23 基しか装置が設置出来ない J-PARC の1つに、この装置を入れさせていただいたということは大きな成果だったと思っています。ただご指摘がありましたように、このプロジェクトが始まってからのあいだに燃料電池自動車を含む環境というのは大きく変化いたしましたして、それに対して私どもがもう少し柔軟に対処して、例えば企業さんをもう少し实际的に巻き込んで、いろいろな意見交換等をしながらか進めるというようなこともあつてしかるべきだったかなと思っています。いただいたさまざまなお意見というのは、基本的には今後はこの基礎・基盤研究を元手にしまして、実際に企業さんへトランスファして、我々も当然それを一緒にやりながら、使える材料をいかに早く開発するかというのが1つのミッションだろうと。それからやはり 3.11 以降、エネルギー全体に対してパラダイムチェンジがあつたという中で、エネルギー貯蔵を水素で出来るかというようなことも含めて、貯蔵材料が活躍するべき場というのはさらに広がつたのではないかとすることも交え、次のプランを真剣に練っていきたいと思います。きょうは本当にもうもありがとうございます。

(西宮分科会長代理) 私の質問に答えてもらっていないのですが、NiLi5 は合金ですが材料物性から出てきましたよね。これが特許はどうなっているのでしょうか、これはすごいので特許はちゃんと取れたかということを知りたいのですが。

(日本原子力開発機構・町田副主任研究員) この件に関しましては特許出願をしたということは聞いてはおりません。おそらくまだ特許出願していないと思います。東北大学工学部さんのほうで特許出願する意思があるかどうか確認したいと思っています。

(内田分科会長) よろしいですか。それではこれで分科会を終了させていただきたいと思います。事務局から今後の予定等、改めてお願いいたします。

10. 今後の予定、その他

11. 閉会

配付資料

- 資料 1-1 研究評価委員会分科会の設置について
- 資料 1-2 NEDO技術委員・技術委員会等規程
- 資料 2-1 研究評価委員会分科会の公開について（案）
- 資料 2-2 研究評価委員会関係の公開について
- 資料 2-3 研究評価委員会分科会における秘密情報の守秘について
- 資料 2-4 研究評価委員会分科会における非公開資料の取り扱いについて
- 資料 3-1 NEDOにおける研究評価について
- 資料 3-2 技術評価実施規程
- 資料 3-3 評価項目・評価基準
- 資料 3-4 評点法の実施について（案）
- 資料 3-5 評価コメント及び評点票（案）
- 資料 4 評価報告書の構成について（案）
- 資料 5-1 プロジェクトの概要（公開）
- 資料 5-2 事業原簿（公開）
- 資料 5-3 事業原簿（非公開）
- 資料 6-1 プロジェクトの詳細説明資料（1）水素貯蔵材料先端基盤研究事業（公開）
- 資料 6-2 プロジェクトの詳細説明資料（2）金属系水素貯蔵材料の基礎研究（公開）
- 資料 6-3 プロジェクトの詳細説明資料（3）非金属系水素貯蔵材料の基礎研究（公開）
- 資料 6-4 プロジェクトの詳細説明資料（4）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（公開）
- 資料 6-5 プロジェクトの詳細説明資料（5）水素と材料の相互作用の実験的解明（公開）
- 資料 6-6 プロジェクトの詳細説明資料（6）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（公開）
- 資料 7 実用化の見通し（非公開）
- 資料 8 今後の予定