

「水素貯蔵材料先端基盤研究事業」

中間評価報告書（案）概要

目 次

分科会委員名簿	1
プロジェクト概要	2
評価概要（案）	8
評点結果	16

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

事務局：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

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。

プロジェクト概要

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) (委託)	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跡し、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盤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。		

V. 基本計画に関する事項	作成時期	平成19年3月 制定
	変更履歴	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)

技術分野全体での位置づけ
(分科会資料6より抜粋)

I. 事業の位置づけ・必要性 (研究開発政策上の位置づけ)



エネルギーイノベーションプログラム

【5つの政策の柱】 I, II, III, V に寄与

I. 総合エネルギー効率の向上

II. 運輸部門の燃料多様化

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

年度	石油依存度 (%)
1973年度	97%
2000年度	98%
2030年度 (目標)	80%

【図】 運輸部門における我が国の石油依存度と目標値】

III. 新エネルギー等の開発・導入促進

IV. 原子力等利用の推進とその大前提となる安全の確保

V. 化石燃料の安定供給確保と有効かつクリーンな利用

公開

事業原簿p.I-(1)~(2)

1 / 46

I. 事業の位置づけ・必要性 (研究開発政策上の位置づけ)



エネルギーイノベーションプログラム

【II. 運輸部門の燃料多様化】

II-i. 共通

II-ii. バイオマス由来燃料

II-iii. GTL等の合成液体燃料

II-iv. 燃料電池自動車および水素関連技術

(1) 固体高分子形燃料電池実用化戦略的技術開発

(2) 燃料電池先端科学研究

(3) 水素製造・輸送・貯蔵システム等技術開発

(4) 水素貯蔵材料先端基盤研究事業

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

(5) 水素社会構築共通基盤整備事業

(6) 燃料電池システム等実証研究

II-v. 電気自動車

公開

事業原簿p.I-(1)~(2)、(添付資料)

2 / 46

I. 事業の位置づけ・必要性 (研究開発政策上の位置づけ)



②「運輸部門の燃料多様化」
に寄与する技術の技術ロードマップ(4/7)

エネルギー分野 技術戦略マップ

No.	エネルギー技術 関連技術	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 水素放出温度の低減化 合金系材料耐腐蝕対策 合金系材料 帯機系材料				
		アラネート系 アロ・イミド系 ポロ・ハイドライド系 複合系 など				
33321	有機系・炭素系 水素貯蔵材料	【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・放出温度低減化 反応速度・耐久性向上 副反応生成物等の発生抑制				
		【有機系水素貯蔵材料】 ステーション内水素発生装置 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				
33331	水素貯蔵容器	水素貯蔵容器コスト (単位あたり)約300~500万円				
		水素貯蔵量 5kg	55~7kg	~10kg	~10kg	~10kg
		圧縮水素容器 液体水素容器 ハイブリッド(高圧水素貯蔵材料容器) 軽量・コンパクト化 断熱性能向上	高強度材料 耐久性向上	【炭素系水素貯蔵材料】 高水素吸蔵量材料の構造設計 または合成材料の確立・適用 (新規形状、化学修飾、元素置換、複合化など)		

公開 事業原簿p.(添付資料)

「水素貯蔵材料先端基盤研究事業」

全体の研究開発実施体制



「水素貯蔵材料先端基盤研究事業」（中間評価）

評価概要（案）

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。

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。

個別テーマに関する評価

	成果に関する評価	実用化の見通しに関する評価	今後に対する提言
金属系水素貯蔵材料の基礎研究	<p>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 (<i>in-situ</i>) 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は評価できる。</p>	<p>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。</p>	<p>「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。</p>

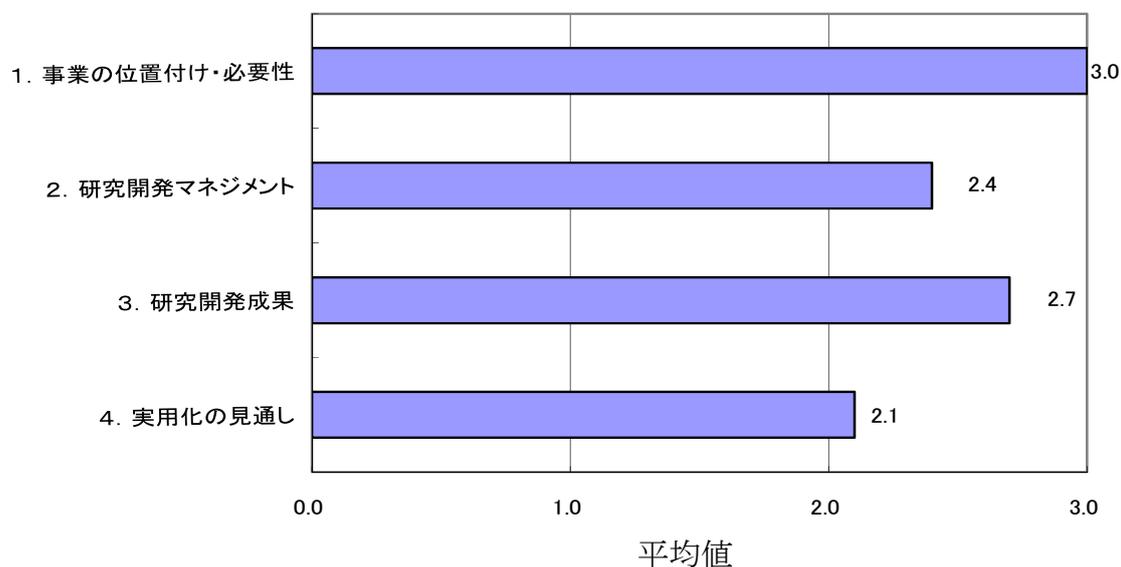
<p>非金属系水素貯蔵材料の基礎研究</p>	<p>ナノ複合水素貯蔵材料という概念で Mg 系新材料を開発し、室温水素吸蔵量 5 w t % を実現した材料における反応速度解析から律速段階を明らかにした成果、また同じく室温水素放出量 5 w t % を実現した LiH-NH₃ システムを作製し、分子動力学シミュレーションで活性表面を解明した成果などは、高く評価される。複合水素化物に関する成果では、混合ガスの分圧制御による熱力学的な平衡温度の制御の可能性など、独創性の高いアプローチが含まれている。その場観察手法の開発などでも、今後の水素貯蔵・放出の動的特性の測定に貢献し得る、注目すべき成果を挙げている。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。</p>	<p>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。</p>	<p>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。</p>
------------------------	---	--	---

<p>水素と材料の相互作用の実験的解明</p>	<p>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。</p> <p>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。</p>	<p>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。</p>	<p>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。</p> <p>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。</p>
-------------------------	---	--	--

<p>計算科学による水素貯蔵材料の基盤研究</p>	<p>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い難いように思われる。</p>	<p>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。</p>	<p>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。</p>
---------------------------	--	--	---

<p>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</p>	<p>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。</p>	<p>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。</p>	<p>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。</p> <p>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。</p>
-----------------------------------	---	--	--

評点結果〔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
1. 事業の位置付け・必要性について	3.0	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
3. 研究開発成果について	2.7	B	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

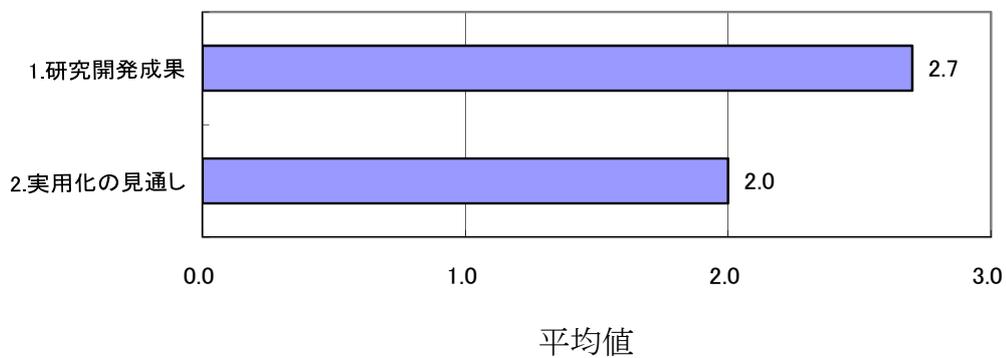
(注) A=3, B=2, C=1, D=0 として事務局が数値に換算し、平均値を算出。

〈判定基準〉

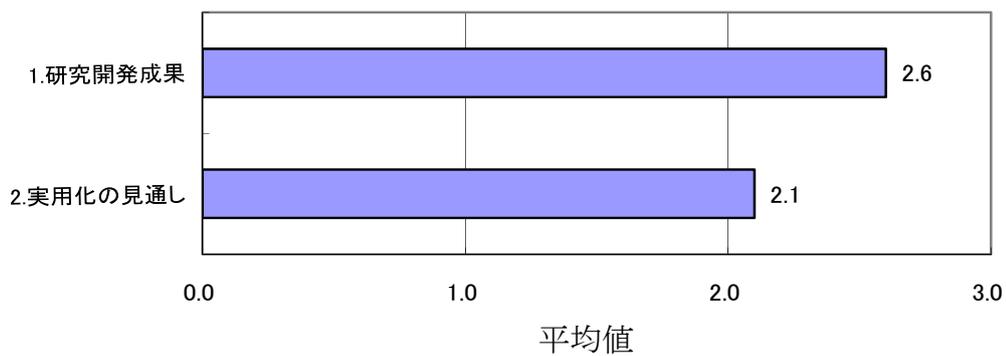
1. 事業の位置付け・必要性について	3. 研究開発成果について
・非常に重要 →A	・非常によい →A
・重要 →B	・よい →B
・概ね妥当 →C	・概ね妥当 →C
・妥当性がない、又は失われた →D	・妥当とはいえない →D
2. 研究開発マネジメントについて	4. 実用化の見通しについて
・非常によい →A	・明確 →A
・よい →B	・妥当 →B
・概ね適切 →C	・概ね妥当であるが、課題あり →C
・適切とはいえない →D	・見通しが不明 →D

評点結果〔個別テーマ〕

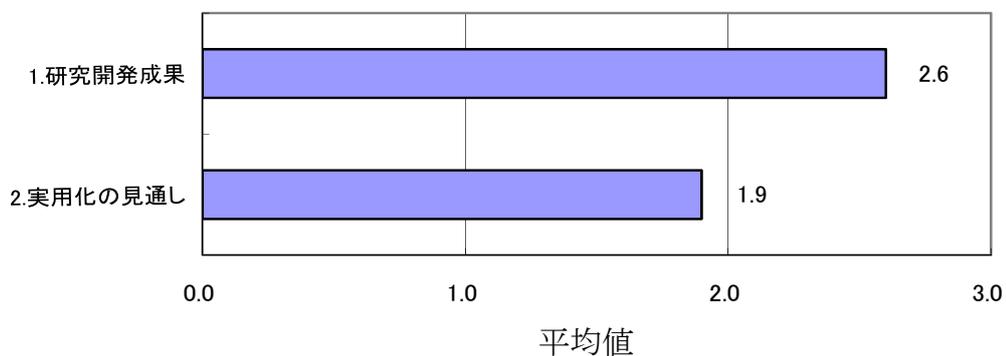
〔1〕 金属系水素貯蔵材料の基礎研究



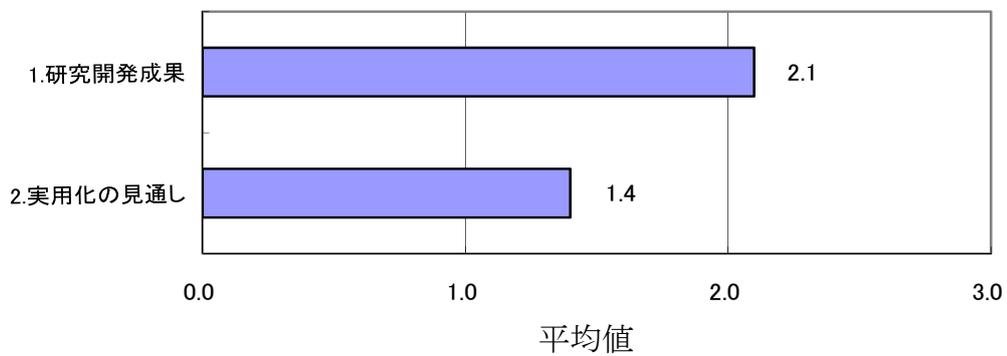
〔2〕 非金属系水素貯蔵材料の基礎研究



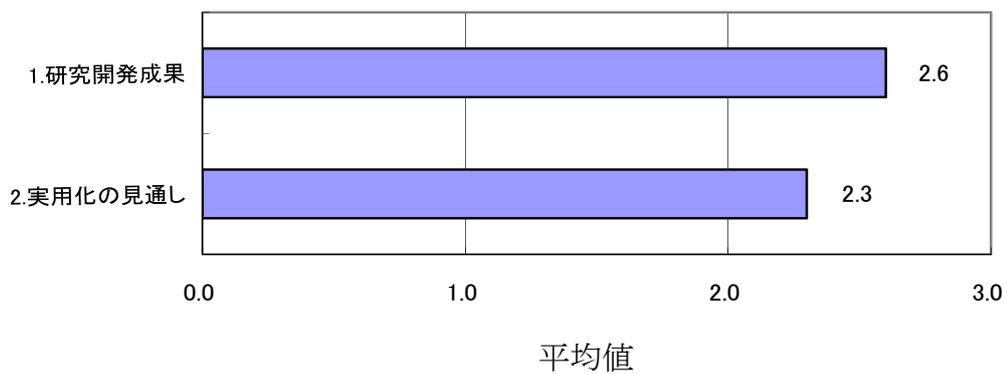
〔3〕 水素と材料の相互作用の実験的解明



[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



個別テーマ名と評価項目	平均値	素点 (注)							
[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	
2. 実用化の見通しについて	2.0	B	A	B	B	B	C	B	
[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	
2. 実用化の見通し	2.1	B	B	B	A	B	B	B	
[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	
2. 実用化の見通し	1.9	B	A	C	A	B	C	C	
[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	
2. 実用化の見通し	1.4	B	B	C	A	D	C	C	
[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	
2. 実用化の見通し	2.3	A	A	B	B	C	B	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