

2.4 研究開発項目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」

【研究開発の概要】

水素を安全かつ大量に貯蔵・輸送する技術の確立は、今後の水素燃料電池車の普及、更には将来の水素社会の構築に向けた必須の課題である。そのためには材料中での水素貯蔵のメカニズムや阻害要因を正しく理解し、貯蔵特性向上への方策を見出すことが重要である。材料中の水素の状態や異なる条件下での貯蔵特性の変化を理解するには、材料モデルに基づく計算科学的手法が有用である。そこで、分子軌道法や密度汎関数法といった第一原理計算法と古典分子動力学法により、金属系、非金属系、カーボン系の各種水素貯蔵材料の水素貯蔵特性とそのメカニズムを解析し、高性能化のための方策を検討した。

【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マイ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。

【本研究開発の構成】

計算科学的手法の水素貯蔵材料への応用を中心に、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、水素貯蔵メカニズムに関する分子動力学的研究、水素貯蔵材料の構造安定性に関する分子動力学的研究、新規水素貯蔵材料のシミュレーション探索研究、水素貯蔵物質の電子状態と動的挙動解析、ゼオライト鋳型炭素をモデル物質とするスピルオーバー水素貯蔵メカニズムの解明、非金属系水素貯蔵物質の電子状態と構造安定性の7研究項目、6研究委託先、1研究再委託先により構成された。

【成果の概要】

貯蔵材料の種類、貯蔵特性、計算手法に応じて各委託先にそれぞれ得意とする分野を分担させて研究を行い、以下のような成果が得られた。

(1) 新規カーボン系水素貯蔵材料の解析と提案

東北大多元研で初めて合成された ZTC（ゼオライト鋳型炭素）は約 $4,000\text{m}^2/\text{g}$ と世界最高レベルの比表面積を持つカーボン材料である。ZTC は炭素原子 30 個程度からなる湾曲したグラフェン断片が 3 次元的に連結した構造を持ち、内包された均一なポア中に水素分子を 2.2 wt% (at 35 MPa) 貯蔵できる。本研究では ZTC に白金を添加し、解離した水素原子を発生させてグラフェン断片に化学吸着させる、いわゆるスピルオーバー現象を応用して水素貯蔵量を増やすことを検討した。分子軌道法および密度汎関数法によ

る ZTC にスピルオーバー水素原子を加えた計算では、グラフェン断片の曲率および位置（中心部・エッジ部）により吸着エネルギーが異なることを見いだした。また一部の炭素原子の窒素原子への置換により、吸着エネルギーを変化させて水素の吸放出温度を制御できる可能性を示した。実際に ZTC に白金を単原子担持した実験では、1 気圧水素中で従来の最大 20 倍のスピルオーバー水素の貯蔵を確認した。

またグラファイト表面上の水素原子の STM 像を第一原理計算により解析し、その正確な吸着位置を解析した。更に Li 原子で修飾したグラフェンシートおよび BN シートを用いた新しい水素貯蔵法を提案した。

(2) 非金属系水素貯蔵材料における添加物効果の解析

非金属系グループで取り組んでいるアミドボラン等の軽元素系材料は、水素吸放出に高温・高圧が必要である、反応進行が遅いなどの問題がある。そこで水素吸放出過程の微視的機構と反応経路を解明するために、アルカリ金属水素化物とアンモニアの反応の第一原理分子動力学計算を行った。その結果、水素放出の過程を動的シミュレーションで追跡することに成功した。水素放出過程のポテンシャル障壁はアルカリ金属原子の電荷に依存し、Li→Na→K の順に障壁が低くなることを示した。この傾向は反応率の実験結果でも確認された。更にニオブ酸化物を触媒として添加した場合の反応障壁の変化を解析した。

一方、BN クラスタへの水素吸着のシミュレーションを行い、Li 原子をクラスタに添加することにより水素吸着量が増大することを示した。同様の計算を、水素貯蔵材料として近年注目を集めている MOF（金属有機構造体）についてもを行い、Li 添加が水素貯蔵量増大に有効であることを示した。

更に、4 wt% 程度の水素貯蔵能を持つ水-水素系の低温・高圧相（クラスレート構造）について、ヘルプガスを添加した場合の安定条件の変化を計算した。その結果、5% のプロパンの添加により、クラスレート形成圧力が 1000 気圧から 50 気圧へ劇的に下がることを見出した。

(3) 金属系水素貯蔵材料の水素誘起構造変化の解析

金属系水素貯蔵材料の研究の歴史は古く、様々な組成の水素吸蔵合金が提案されている他、近年は金属ナノ粒子による水素貯蔵も注目されている。金属系材料の課題は、重元素を用いることによる重量密度の低さと、水素吸放出サイクルに伴う金属格子の変形による耐久性の低下である。そこで金属ナノ粒子および金属バルクの水素化の古典分子動力学計算を行い、金属格子への影響を調べた。その結果、BCC 金属ナノ粒子では水素化に伴う BCT への変態が粒界生成を引き起こしており、それが粒子サイズと M-H 相互作用の強さに応じて異なる頻度で起こることが分かった。FCC ナノ粒子では更に 20 面体構造を加えた 3 つの構造が競合して粒界が生成する様子が観察された。更に水素圧を変えた計算から、 $0 \leq H/M \leq 1$ の領域においてプラトーを伴わない傾いた PC 等温線が得られた。これは実験で得られている PC 等温線の特徴と一致している。

一方、金属バルクの水素化に伴う構造変化については、 AB_2 ラーベス相合金の A、B 元素を変えたシミュレーションを行い、A、B 元素半径比の特定条件下において非晶質化が起こる様子が再現された。結果は実験と良く一致しており、B 原子の副格子の不安定化によって非晶質化が起こることが理論的に示された。またバルクの PC 等温線につ

いても検討を行い、各格子間位置における水素吸着エネルギー等の値から、複数のプラトーを伴う PC 等温線の再現に成功した。

【これまでの成果】

2.4.1 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 ナノシステム研究部門

(1) 新規カーボン材料 ZTC への水素吸着特性評価

(研究開発項目 4-2-5※ および 4-1-7~8)

※ 次節 4.2 の項目であるが便宜上ここで説明する。

【研究目的】 高表面積カーボン材料の水素貯蔵への応用が期待されている。その中で東北大学多元研で開発されたゼオライト鑄型炭素(ZTC)は、室温 34MPa の水素圧力下で 2.2wt%の水素貯蔵量を持ち、純粋なカーボン材料としては世界最高クラスの水素貯蔵能を誇っている。ZTC は多孔性でポア中に水素分子を物理吸着することで水素を貯蔵していると考えられるが、物理吸着のみでの大幅な水素貯蔵量の増大は期待できないため、化学吸着も視野に入れた技術開発が今後の課題である。そこで、触媒により水素分子から解離した原子状水素をカーボン表面へ拡散し吸着させる「スピルオーバー水素貯蔵法」について、東北大多元研と共同で検討を行った。カーボン表面の水素吸着特性を向上させるためには、炭素原子の別元素での置換や、カーボン表面構造の最適化などが考えられる。これらの方法による水素の吸着特性変化を計算科学的に推算し、実験結果と比較することにより、貯蔵特性向上の可能性を検討した。

【計算手法】 ZTC は、鑄型であるゼオライトの空孔に収まる形で生成した屈曲グラフェン断片が小単位となって相互連結した、3次元周期的な構造を取ると推測されている。周期構造自体を第一原理で計算することはサイズの的に困難なため、小単位に似ていると考えられる4種類のモデル分子(図 III.2.4-(1))について解析を行った。計算手法には分子軌道法と経路積分分子動力学法を用いた。絶対零度での構造緩和とエネルギー解析には分子軌道法(MP2、HF、B3LYP)を、有限温度での水素拡散の解析には経路積分分子動力学(PIMD)法を用いた。計算プログラムには GAMESS、Gaussian03、および自作のコードを用いた。

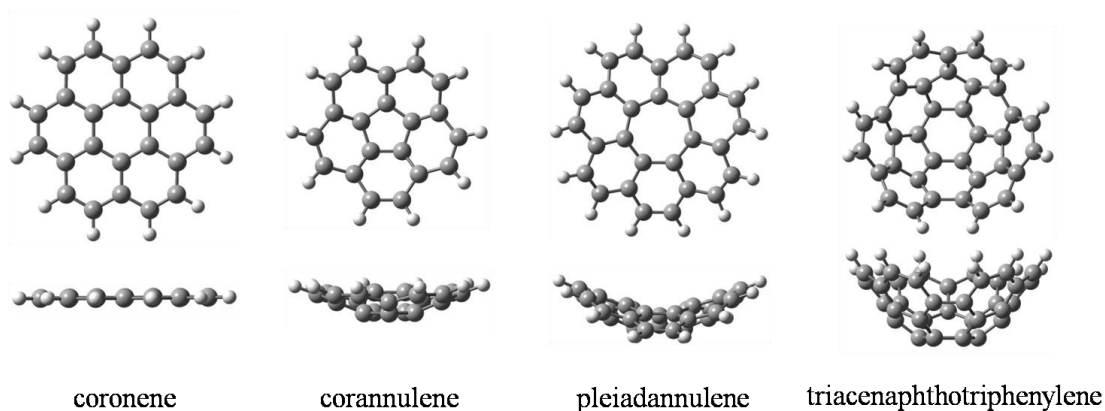


図 III.2.4-(1) モデル分子4種の正面および側面図

【窒素置換の効果】 部分的に炭素原子から窒素原子に置換した場合の水素吸着への効果を調べた。平面状分子 coronene (図 III.2.4-(1) 左) 中の炭素 2 か所を窒素で置換した 19 種のモデル分子について、HOMO-LUMO gap および分極率を比較した。その中で特徴的な 3 種の窒素置換分子 (N-I、N-II、N-III=図 III.2.4-(2)) を選び、水素分子が解離して化学吸着する際の構造安定性とエネルギー変化を計算した。解析の結果、窒素の置換位置により水素が吸着されやすいサイトが大きく異なることが分った (図 III.2.4-(2))。N-I や N-II の様に中心部からエッジ手前までの炭素を窒素で置換した場合 (C→N) では、窒素置換位置により吸着エネルギーのばらつきが大きいものの、N-I の様に多くのエッジ部で吸着エネルギーが増大するケースも見い出された。一方、N-III の様にエッジ部の炭素を窒素で置換した場合 (C-H → N) には、窒素置換位置による違いが小さく、構造安定性も置換前と比べてあまり変動がなかった。このように窒素置換位置や水素吸着位置によりエネルギー利得が大きくばらつくという結果は、実験的に得られている窒素置換カーボン材料の水素貯蔵量が増える／減る／変わらないという異なる報告が存在する理由を説明していると考えられる。解析したモデルの中では N-I が水素の化学吸着に最も有利であり、水素吸着位置としては窒素置換系全般にエッジ部が有利であることが分った。水素貯蔵量増加のためには、置換位置依存性が大きいいため、選択的な置換技術が必要であることが示唆される。

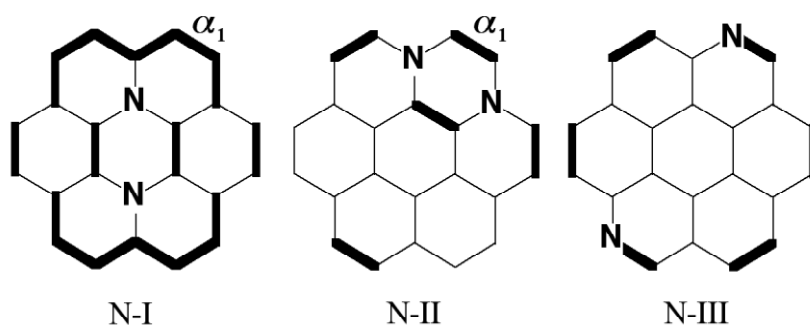


図 III.2.4-(2) 特徴的な 3 種類の窒素置換モデル分子と水素吸着サイト (太線)

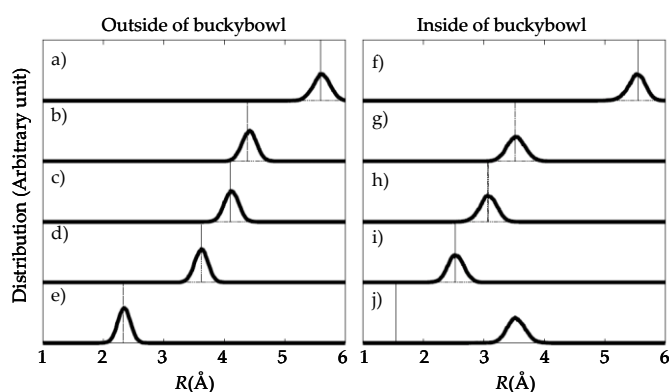
【曲率の効果】 水素の吸着エネルギーが ZTC 中の小単位の曲率によりどう変化するかを解析した。図 III.2.4-(1) に示した、曲率の異なる 4 種類のモデル分子について水素吸着サイトと吸着エネルギーを計算した。その結果、平面に近い構造では内側よりエッジ部の吸着エネルギーが大きかったが、曲率が大きい場合は逆転して凸面側の中心部の吸着エネルギーが大きくなった。全般に曲率が大きいほど水素は強く吸着する。この結果から、十分な量の spillover 水素が供給されれば、化学吸着によってカーボン表面に保持することは容易であると推測される。但し吸着エネルギーの推算値が 100~200 kJ/mol と大きいため、室温付近での水素放出は難しいと予想される。東北大多元研での実験では、150°C までの昇温で spillover 水素が完全に放出されることが確認されており、現実系でも計算モデルに近い形で水素が貯蔵されているものと考えられる。

また spillover 水素がカーボン表面で拡散する経路についても検討した。曲率を持つカーボン表面上で水素原子の位置を変えてポテンシャル表面を解析した結果を表 1 に示す。曲率の小さい場合はカーボン表面上を水平移動する際のポテンシャル障壁が垂直移動（解離）の障壁よりも高いが、曲率の大きい場合には逆転し水平移動の方が障壁が低いという結果が得られた。この傾向はモデル分子の中心部よりもエッジ部でより顕著であった。また水素原子がエッジに移動し全てのエッジ部が水素化された場合には、中央部での吸着エネルギーが増大した。spillover 水素の貯蔵量を増やすポイントとして、曲率を制御して最適な吸着エネルギーと適切な拡散経路の双方を得ることが重要と考えられる。

表 1 屈曲グラフェン凸面上での水素拡散のポテンシャル障壁 (kJ/mol)

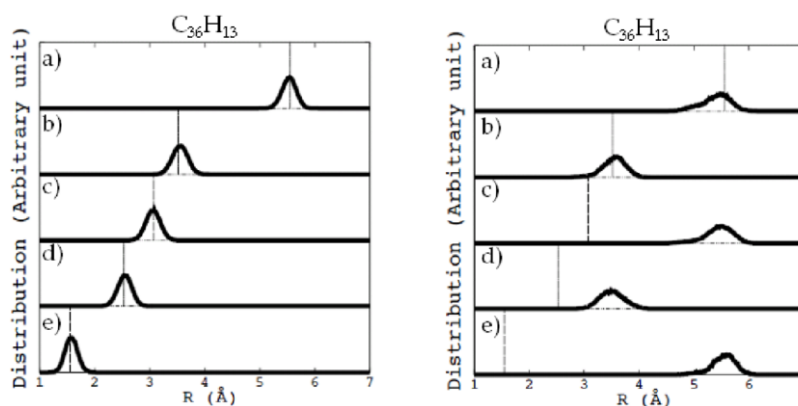
	中心部		エッジ部	
	水平移動	垂直移動	水平移動	垂直移動
$C_{24}H_{12}$	–	91.3	178.1	151.1
$C_{20}H_{10}$	167.0	154.9	171.5	173.5
$C_{24}H_{14}$	170.1	144.6	189.4	169.2
$C_{36}H_{12}$	184.5	192.6	178.6	181.9

【凸面側と凹面側での水素拡散】 PIMD法によって得られた300Kにおける吸着水素原子の存在位置の一次元分布を図III.2.4-(3) に示す。横軸は、 $C_{36}H_{12}$ の重心と吸着した水素原子の距離を示している。ピークに幅は熱振動を反映している。また垂直の破線はPM3によって得られた吸着サイトの位置である。 $C_{36}H_{12}$ の凸面側と凹面側にそれぞれ安定な吸着サイトがあり、凸面側は全て安定であるが、凹面側で δ 炭素付近に置いた水素は β_1 炭素付近への移動が観察された。この結果は、凹面側中心部では水素の吸着が不安定であり、室温付近でもエッジ部に向けて移動することを示している。核の量子性を考慮しない従来のMD法を用いた計算ではこの凹面側での δ 炭素上水素の β_1 への移動が再現されておらず、水素の吸放出温度を精密にシミュレートするためには原子核の量子性の考慮が重要であることを示している。



図III.2.4-(3) 300 KのPIMD計算の初期（左）および緩和後（右）における吸着水素存在確率の一次元分布。a)およびf)、b)およびg)、c)およびh)、d)およびi)、e)およびj)の初期構造はそれぞれ、 α 位、 β_1 位、 β_2 位、 γ 位、 δ 位の炭素に水素原子を吸着させた構造を用いている。

【低温と高温での水素拡散】 100 K および 900 Kでの、 $C_{36}H_{12}$ 凹面側での水素原子の一次元分布を図III.2.4-(4)に示す。300 Kでの結果と異なり、100 Kでは δ 位置は安定吸着サイトである。一方 900 Kでは、 δ に加えて γ 、 β_2 の水素も不安定化し、それぞれ β_1 付近、 α 付近へ移動することが分った。この結果は、適切な温度を設定することによって水素吸着が可能な位置とサイト数、すなわち水素吸着量を制御できる可能性を示している。また別途行った軽水素と重水素の比較計算では、重水素の方が水素貯蔵量が多くなるという東北大多元研の実験結果と対応する結果が得られた。



図III.2.4-(4) 100 K（左）および 900K（右）のPIMD計算に得られた吸着水素の一次元分布。図III.2.4-(3) で用いたものと同じ初期配置を仮定した。

【結論】 以上述べたように、計算科学的手法はZTCの水素吸蔵特性に対する元素置換・表面構造・温度効果等、様々な要因について定量的な情報を与えることができた。これらの要因に伴う特性変化をうまく組み合わせることにより、目標とする貯蔵特性に近づけることが可能になると考えられる。具体的には、お椀構造の凹面側の、温度により安定性が変化する吸着サイトを利用した水素吸放出プロセスの温度制御設計が考えられる。その他にも元素置換や曲率に伴う変化をうまく利用した貯蔵特性制御や貯蔵量増加が期待される。

<本項目で得られた評価手法と材料設計指針>

- ・分子軌道法および経路積分法を用いて、屈曲グラフェン表面上の水素吸着サイトと拡散能を評価する手法を確立した。

- ・スピルオーバー水素は ZTC 構造ユニットの主に凹面側を拡散し、エッジ部および凸面側に吸着する。
- ・ZTC 構造（元素置換・曲率）の変化により、カーボン表面における水素拡散と吸着サイトが制御可能である。
- ・スピルオーバー水素の導入により ZTC の水素貯蔵量増大が可能である。

(2) LaNi₅ および NaAlH₄ 中の水素拡散の特性評価

（研究開発項目 4-1-1~7）

【研究目的】 LaNi₅とNaAlH₄という2つの代表的な、性質の異なる水素貯蔵物質を対象に、材料中での水素拡散特性を解析した。LaNi₅は水素吸放出速度は速いが重量貯蔵密度が低く、NaAlH₄は貯蔵密度は高いが水素吸放出速度が遅い。これらの違いは水素と貯蔵物質を構成している元素の結合の強さに起因している。本項目では計算科学的解析による結晶質物質中の水素拡散の特性評価技術の確立を目的とする。

【計算手法】 計算プログラムとして産総研で開発された平面波基底を用いたPAW法による密度汎関数法コード QMAS、及びオーダーN法を含む局所基底を用いたコード OpenMX を使い、各結晶中の水素占有サイトと拡散経路に関するエネルギー解析を行った。ポテンシャル表面の計算にはナッジドエラスティックバンド (NEB) 法を用いた。

【LaNi₅ 中の水素拡散】 水素の主要な拡散経路は、異なる水素吸蔵サイトを結ぶ最小エネルギー経路 (Minimum Energy Path, MEP) であると考えられる。LaNi₅ 場合、水素の吸蔵サイトとして 6m, 12o, 4h, 12n, 3f 等が考えられるが、実験的に見いだされている吸蔵サイトは 6m, 12o, 4h, 6i の4つである。そこで 6m, 12o, 4h を含む面と 12n, 3f, 6i を含む面でのポテンシャルエネルギー表面を計算した。前者のエネルギー表面を図 III.2.4-(5) に示す。ここから、m-o, o-h, h-h の水素移動の経路と活性化エネルギー、零点振動エネルギーを計算した。その結果、3f サイトは不安定なこと、Ni 原子の緩和に伴い 12n サイトも不安定化し、代わりに 6i サイトが安定化することが示された。12o-6i サイト間の MEP を解析したところ、MEP は3次的にわずかに湾曲していることが分った。同様の方法で、全ての水素吸蔵サイトをつなぐ他の拡散経路の位置及び活性化エネルギーも決定した。活性化エネルギーの値は最小で 0.04eV 程度、最大で 0.4eV 程度の値が得られた。最小の活性化エネルギーの温度換算値は水素放出温度と同程度、一方で最大の値は核磁気共鳴により測定された実験値と同程度であった。

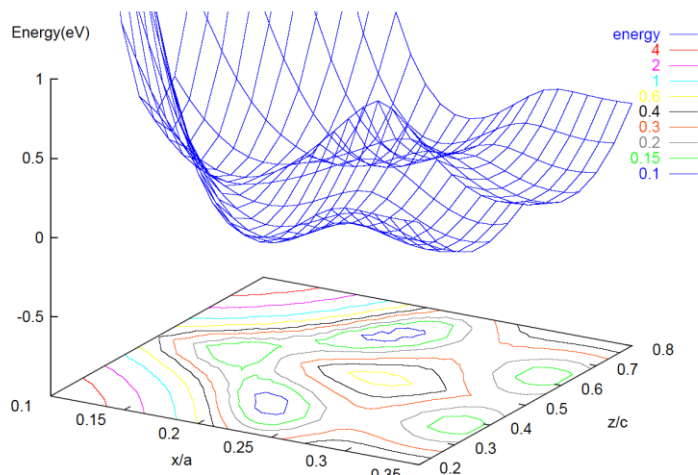


図5 LaNi₅のm, o, hサイトを
含む面のポテンシャルエネ
ルギー面 (La及びNi原子の位
置を緩和した場合)。エネルギー
が極小となる位置が水素吸
蔵サイト、極小点を結ぶ最もエ
ネルギーの低い経路が MEPで
ある。

【NaAlH₄中の水素拡散】 NaAlH₄中の水素拡散はLaNi₅よりも困難であると考えられる。水素は格子間原子ではなくAlH₄の形でAl原子と配位結合している。そのため、AlH₄の中の1つの水素が結晶欠陥として存在する隣接のAlH₃の水素空孔へ向けて移動することが拡散過程の候補として考えられる。この過程についてNEB法によりMEP及び活性化エネルギーを計算した。LaNi₅と異なり、NaAlH₄中のMEPは大きく湾曲しており、湾曲部分付近でのNa原子位置の変化が大きい。これはHとNa⁺のクーロン相互作用によるものと考えられる。水素拡散の活性化エネルギーは0.3eV程度と見積もられた。この値は報告されている実験値よりやや大きい、LaNi₅における活性化エネルギーの最大値よりはやや小さかった。

NaAlH₄の水素吸放出速度を上げるために、適切な触媒元素を添加することが提案されている。実験的にTi添加により水素吸放出速度が上がるが見いだされているが、触媒元素の果たす役割は明確でない。そこでTi添加と無添加の場合について、水素空孔有無の影響を解析した。その結果、Tiを添加した系ではTiは周囲のAlと共にTiAlH_x、TiAl₂H_y型のクラスタ構造が形成され、周囲の原子が変位した状態で安定化することが分った(図III.2.4-(6))。水素空孔及びTi近傍での電子状態を調べるために、部分電子状態密度解析を行った結果、水素空孔なし、Tiなしの場合にはフェルミ準位付近に状態が存在しないのに対し、水素空孔あり、Tiなしの場合、及び水素空孔なし、Tiありの場合、欠陥近傍でフェルミ準位付近にピークが現れ、金属的な結合が確認された。一方、水素空孔あり、Tiありの場合にはフェルミ準位付近に状態は存在せず、水素空孔なし、Tiありの場合と比較するとピークが低エネルギー側に移動した。Ti添加によって水素空孔形成エネルギーがわずかに下がり、空孔が安定化すると結論が得られた。Ti添加NaAlH₄中では、Ti近傍に存在する空孔に向けての水素の移動がより容易となり、脱水素反応にも有利になっていることが示唆される。

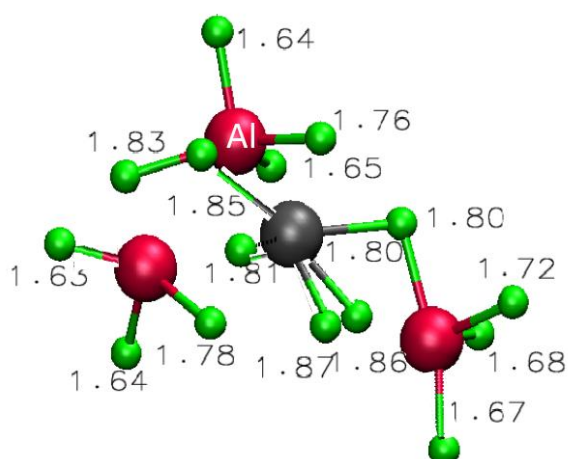


図6 Ti 添加された NaAlH_4 の Ti 原子周辺の原子配置の例。Ti (灰) 近傍に 5 個の水素 (緑) が配位している一方、水素の不足している AlH_3 クラスタが見られる。

【結論】 以上のように、密度汎関数法と NEB 法を用いて 2 種類の性質の異なる水素貯蔵材料中の水素拡散特性を定量的に再現することができた。Ti 添加 NaAlH_4 の計算では水素空孔の安定化と Ti 周囲の構造変化で水素吸放出特性が改善されるメカニズムを明らかにできた。異なる材料と添加元素の組み合わせの計算を進めることにより、水素貯蔵特性改善への理論的バックアップが可能になると期待される。

<本項目で得られた評価手法と材料設計指針>

- ・ 第一原理計算を用いて、結晶性水素貯蔵材料中の水素吸着位置、拡散経路、添加金属元素効果を評価する手法を確立した。
- ・ NaAlH_4 中の水素拡散能増大には Ti 添加が有効である。

2.4.2 水素貯蔵メカニズムに関する分子動学的研究

産業技術総合研究所 ナノシステム研究部門

(1) 金属バナジウム中の格子欠陥と水素貯蔵メカニズム変化

(研究開発項目 4-2-6~7)

【研究目的】 バナジウム V は室温付近で水素吸放出が可能な bcc 金属で、その合金は有望な水素吸蔵材料として多くの研究がなされてきた[1]。金属系グループが行った V-Mo 系および V-Cr 系 β 相水素化物の NMR 解析では、金属格子中の水素占有サイトと拡散挙動が置換元素 (Mo、Cr) によって異なることが示された。また金属系貯蔵材料では水素の繰り返し吸放出に伴う特性劣化が問題となるが、その一部は格子欠陥の増加によるものと推測されている。本項目ではバナジウムの一部を Mo や Cr で置換した場合 (0 次元欠陥) の水素貯蔵メカニズム変化の原因を調べるとともに、転位 (1 次元欠陥) および表面・界面 (2 次元欠陥) を含む系について計算科学的解析を行い、水素貯蔵特性への影響を調べた。

【手法】 元素置換 (点欠陥) については密度汎関数法、線欠陥および面欠陥については古典分子動力学法により解析した。密度汎関数法では $2 \times 2 \times 2$ の bct セルに 16 個の金属原子 (V, Mo, Cr) と 8 個 + 数個の水素原子を配置した β 相構造モデルを用いて各格子間サイトの水素吸蔵エネルギーを求めるとともに、NEB 法によりサイト間の水素拡散障壁を計算した。計算コードには VASP を用いた。古典分子動力学法では、数千~数万原子の V と H からなる単結晶に転位や表面を導入した構造モデルについて、半経験的原子間ポテンシャルに基づいた計算を行った。

【Mo および Cr 置換 (点欠陥) の効果】 密度汎関数法により得られた結晶構造および格子定数は文献値を良く再現し、 c/a 比の元素置換量依存性も金属系グループの実験結果とほぼ一致した (図 III.2.4-(7))。NEB 法によるエネルギー障壁の解析では、純粋な β 相では O サイト占有水素の拡散障壁が約 0.6 eV と高く室温付近では拡散しにくいこと、 $H/M > 0.5$ では T サイト占有水素が増加し拡散障壁が 0.3 eV 程度まで低下することが分った。元素置換の効果は Mo と Cr で異なり、Mo 置換では Mo 近傍のサイト間エネルギー障壁が増大したが (図 III.2.4-(8))、Cr 置換ではその差は小さかった。これらの結果は金属系グループで得られている実験結果と整合しその発現メカニズムを説明するものである。

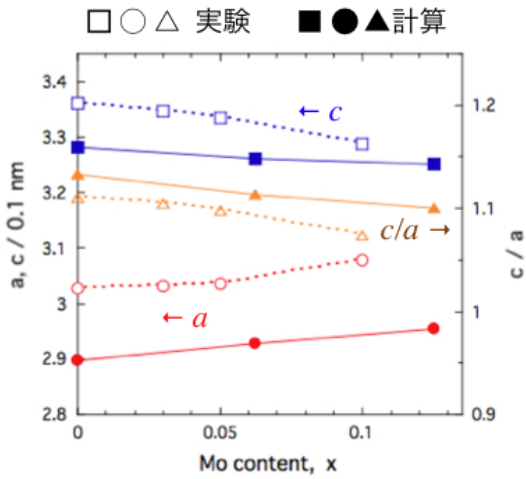


図 III.2.4-(7) V-Mo系 β 相水素化物の格子定数の Mo 濃度依存性。白抜きは実験値 (H/M=0.68、室温)、黒は計算値 (H/M=0.5, 0 K)。

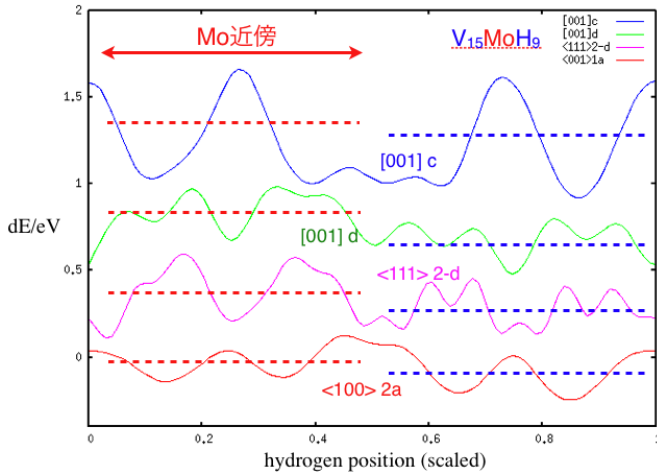


図 III.2.4-(8) V-Mo 系 β 相水素化物中での水素拡散経路上のポテンシャル変化。指数は仮定した拡散経路を示す。

【転位（線欠陥）による動径分布変化】 水素吸蔵に伴い金属中の欠陥が導入されるが、欠陥密度が高くなると水素拡散や耐久性に影響を及ぼす。そのため欠陥密度の定量法が重要である。金属系グループでは、中性子全散乱法で得られた長距離相関中に転位やその他の欠陥情報が含まれていると考え、その解析を進めている。そこで転位を含む系について古典分子動力学計算を行い、10 nm までの動径分布関数をシミュレートした。図 III.2.4-(9) に結果を示す。単結晶に比べて転位を含む系では中～長距離の分布関数の減衰が大きいことが分る。転位密度を変えた計算では減衰の大きさとの相関が明瞭に示された。これらの結果に基づき、水素吸放出に伴う材料中の転位密度の定量が可能になると期待される。

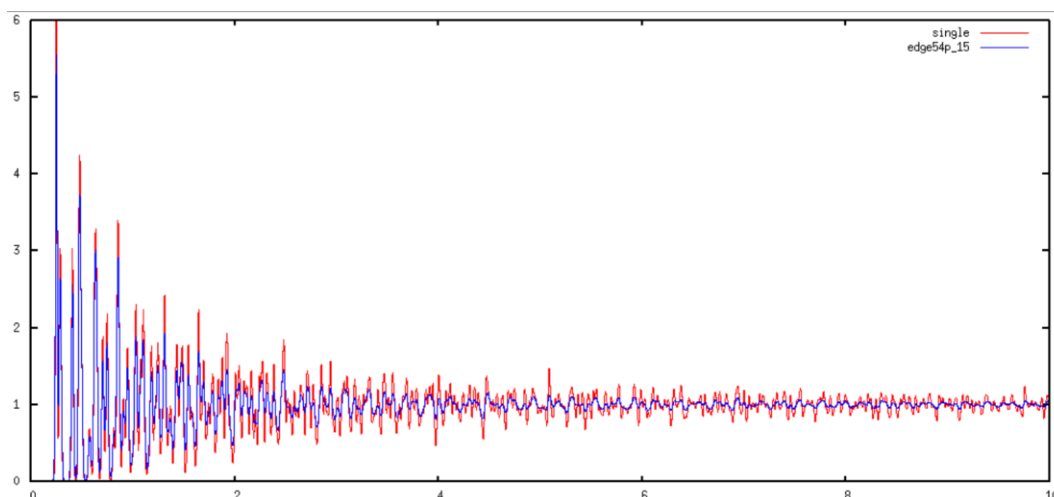


図 III.2.4-(9) 単結晶（赤）および転位モデル（青）の V-V 動径分布関数

【表面（面欠陥）の効果】 水素貯蔵における金属表面の影響を調べるために、半径 1～5 nm のナノ粒子モデルについて古典分子動力学シミュレーションを行った。水素原子はまず表面のホローサイトに吸着し、その後内部へ拡散した。水素化前後の構造変化は仮定した粒子形状によって異なった。 $\{110\}$ 面で作られたナノ粒子では、水素化に伴い面境界（エッジ）と粒子内部で構造が変化する様子が観察された（図左）。一方、 $\{100\}$ 面で作られたナノ粒子では、表面原子の再配列により水素化前に発生していた変形がホローサイトへの水素吸着により一旦 bcc 構造へ戻り、その後、水素の粒子内部への拡散に伴い別の構造変化が起こる現象が観察された（図右）。ナノ粒子の水素化の際に起

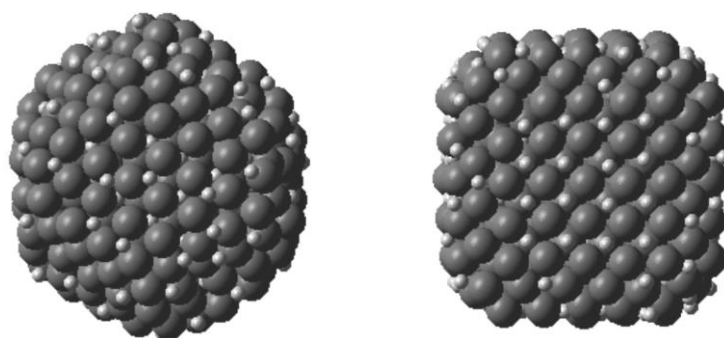


図 III.2.4-(10) 2種類のナノ粒子モデルの水素化初期のスナップショット。

白が水素原子、黒がバナジウム原子。

左： $\{110\}$ 表面モデル、右： $\{100\}$ 表面モデル

この内部変化については次の研究項目で詳述する。

【結論】 密度汎関数法と古典分子動力学法を用いて、バナジウム中の点、線、面欠陥が水素貯蔵メカニズムに及ぼす影響を解析した。Mo および Cr 置換（点欠陥）では置換元素によって水素貯蔵特性への影響が異なること、O サイト占有水素の T サイトへの移

動、置換元素近傍での水素拡散障壁が変化することを計算によって示した。転位（線欠陥）を含む系の計算では、中性子全散乱実験で得られた動径分布関数の変化を説明することができた。表面（面欠陥）を含む系では、解離水素原子の表面吸着と構造変化が表面指数によって異なることを示した。水素貯蔵特性に違いが出るのが計算によって確認された。

<本項目で得られた評価手法と材料設計指針>

- ・ 第一原理計算に基づいた BCC 金属での元素置換効果の評価手法を確立した。
- ・ BCC 金属において母相元素より原子半径の大きな元素で一部置換すると、c/a 比を 1 に近づけ、O サイト占有水素を T サイトへ移動させ、置換元素近傍の水素拡散障壁を増大する効果を持つ。
- ・ 母相より原子半径の小さい元素の場合、上記の効果は小さい。

(2) 金属ナノ粒子の水素貯蔵メカニズム

(研究開発項目 4-2-1~4)

【研究目的】 ナノ粒子の特長は比表面積が大きいことで、水素吸放出速度の向上や表面活性による特性改善の効果が期待できる。しかし現実のナノ粒子の水素化はもっと複雑であり、PC等温線におけるプラトーの消失や、水素吸放出に伴う欠陥の導入、非晶質化等が観測されている。貯蔵特性向上を実現するには、まずナノ粒子に特徴的な水素化メカニズムを理解することが重要である。水素化時のナノ粒子内部の変化を実験的に捉えることは困難なため、本項目ではモデル化した金属ナノ粒子への水素吸蔵を古典分子動力学によりシミュレートし、ナノ粒子内部で起こっている現象の把握と、それらが各種条件でどのように変わるかについて解析した。

【手法】 球形で直径1 nm~10 nmのbccおよびfcc単体金属ナノ粒子に水素原子を加えた系について古典分子動力学計算を行った。金属-金属間の相互作用にはbcc-Feおよびfcc-NiのEAMポテンシャルを用い、M-H相互作用には多様な金属-水素系を想定したシミュレーションを行うために、Rudaらによって提案された各系のM-H相互作用関数に結合半径および結合エネルギーを可変とする2つのパラメータ (Δr , ϵ) を導入して用いた。H-H相互作用には理論計算によって提案された反発型のポテンシャルを用いた。H-H相互作用が水素分子の結合を表現できないため、以下では水素分子解離後の水素原子がナノ粒子表面から粒子内部への侵入し吸蔵される過程について議論する。

【ナノ粒子内部の吸蔵水素分布】 粒子内部への水素原子拡散の時間発展には強いポテンシャル・パラメータ依存性が確認された。特にエネルギー・パラメータは水素の吸蔵量と拡散係数に大きな影響を与えることが分かった。図 III.2.4-(11)に水素原子の

粒内拡散に関するエネルギー・パラメータ依存性を示す。金属-水素の相互作用増大とともに表面付近での吸蔵量は増大するが、水素原子が吸蔵サイトにトラップされる度合いも強まり、結晶内部への拡散は遅くなった。この結果は、材料表面に水素化物皮膜が生成して材料内部への水素拡散が阻害されるという一部で報告されている実験事実とも整合している。

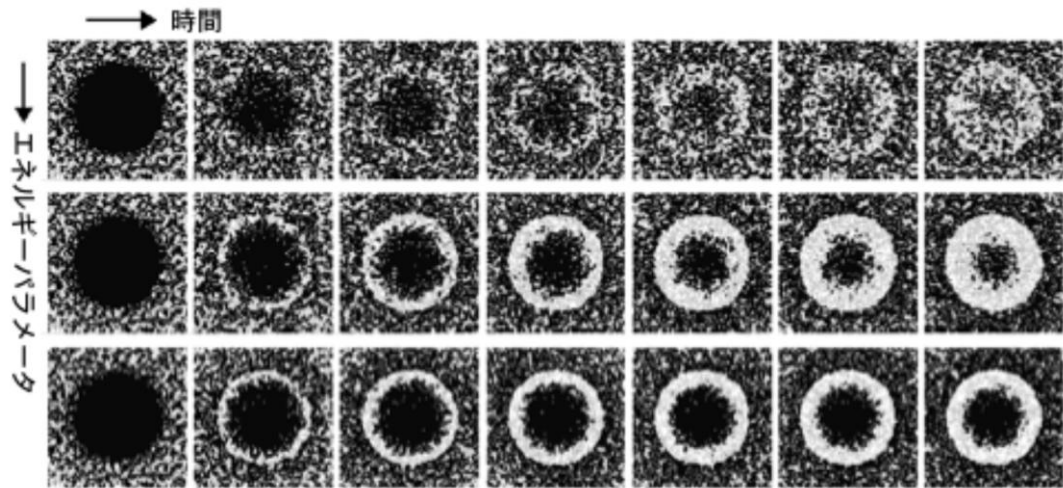
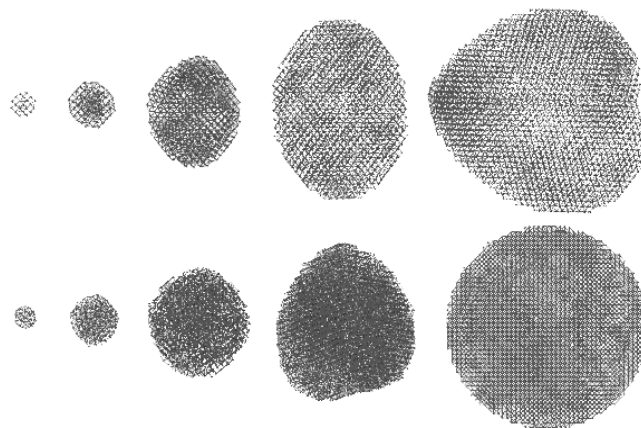


図 III.2.4-(11) ナノ粒子内部への水素原子拡散とパラメータ依存性（断面図）

【水素化による構造変化と粒径依存性】 ナノ粒子の水素化の際に粒子内部で自発的に界面が形成されるケースが観察された。図III.2.4-(12)に5つの粒径におけるbccおよびfcc金属ナノ粒子の水素化の際の構造変化を示す。Bccナノ粒子ではbct転移にともなう粒子の一軸伸長や粒界生成が観察された。生成した界面は主に $\{110\}<001>$ の対称傾角粒界で、時間とともに移動した。Fccナノ粒子では小粒径では20面体構造が生成し、中間の粒径では粒界を伴った歪んだfcc構造が、大粒径では欠陥の無いfcc構造がそれぞれ得られた。格子歪みや粒界生成は水素吸放出に伴う材料劣化の一要因であるが、ナノ粒子においても発生していることが推測される。



図III.2.4-(12) 水素化bcc（上）およびfcc（下）ナノ粒子の構造変化。
粒径は左から1,2,4,6,8 nm。

【水素貯蔵量の粒径依存性】 図 III.2.4-(13)に fcc 金属ナノ粒子における水素吸蔵量 (H/M) の粒径依存性およびエネルギー・パラメータ依存性を示す。全ての ϵ 値において粒径の増加に伴い水素貯蔵量は増加した。水素が貯蔵されるサイトは相互作用パラメータによって変化し、M-H 相互作用が弱い場合は殆どが八面体サイト (6 配位 H) に貯蔵されたのに対して、相互作用が強い場合は四面体サイト (4 配位 H) に多く貯蔵された。四面体サイトへの貯蔵が全体の H/M 値を増大させる要因である。

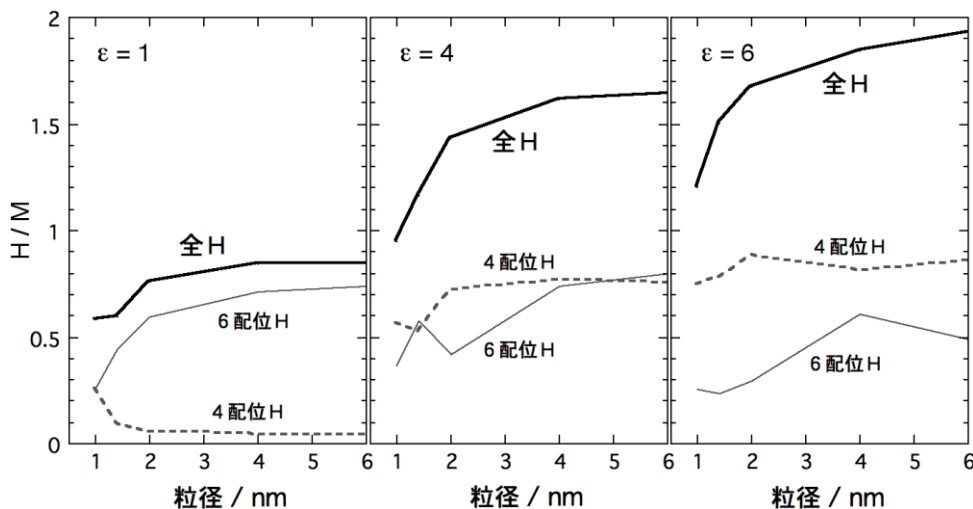


図 III.2.4-(13) 水素吸蔵量 (H/M) の粒径および相互作用パラメータ (ϵ) 依存性

【PCT 曲線の推算】 水素貯蔵材料において PCT 曲線は基礎的かつ重要な特性であり、その予測が可能になれば材料開発への強力な支援となる。図 III.2.4-(14)にシミュレーション・セル内の水素原子数を変えた際の固相中の水素平衡濃度の変化から求めた PCT 曲線を示す。ナノ粒子ではプラトーを伴わない傾いた PCT 曲線が山内らによって実験的に得られているが、今回の計算結果は温度変化、粒径依存性を含めてその特徴を良く再現している。。

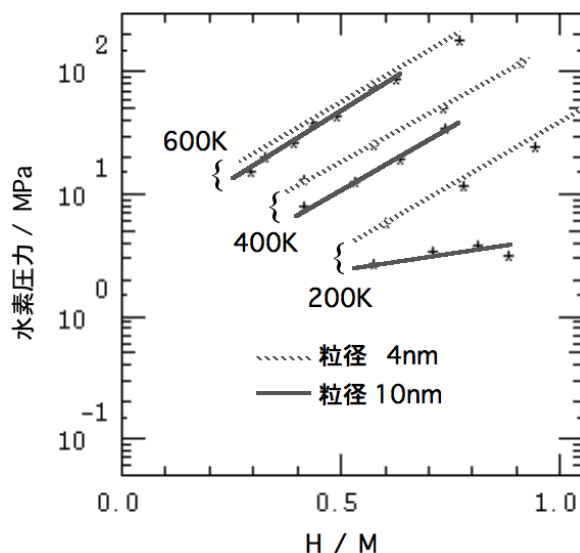


図 III.2.4-(14)
ナノ粒子の PCT 曲線の推算結果

【結論】 以上のように古典分子動力学法による計算結果は、金属ナノ粒子への水素吸蔵を現象論的に良く説明していると考えられ、ナノ粒子の応用技術開発に向けて現象的な理解を深めるには非常に有効と思われる。現在の方法はモデル計算の要素が強いため、モデル原子間相互作用と現実系との対応付けが必要であるが、既にバナジウム系とアルミニウム系において第一原理計算を用いた M-H 相互作用の定量を行っている。このような相互作用関数の整備を進めることにより、近い将来、定量的予測が可能なシミュレーション技術を確立できると期待される。

<本項目で得られた評価手法と材料設計指針>

- ・古典分子動力学法に基づいた金属ナノ粒子中の水素貯蔵特性、構造変化、PC 等温線の評価手法を確立した。
- ・金属ナノ粒子中の貯蔵水素分布は2つの原子間相互作用パラメータの大小により3種類に分類される。吸蔵量増大には半径パラメータを、表面層から粒子内部への水素拡散促進にはエネルギー・パラメータを下げる方向での制御が必要である。

(3) 新規カーボン材料 ZTC の水素貯蔵メカニズム

(研究開発項目 4-2-5)

4.1 (1) に記載した

2.4.3 水素貯蔵材料の構造安定性に関する分子動力的研究

(独) 物質・材料研究機構

金属系水素貯蔵材料について、貯蔵メカニズムを解明し、高性能貯蔵材の開発指針を得ることを目的として原子論的基礎研究を行った。水素吸蔵特性を直接表現するのが、水素圧力(P)-組成(C)-温度(T)の関係を表すPCT曲線であり、その基本になるのが構成相の構造安定性である。V及びAB₅ (A=希土類)系について、水素吸蔵特性を支配する重要な因子である構造安定性について第一原理計算に基づく解析を行った。

第一原理法とフォノン解析に基づく構造安定性：

バナジウムVは純金属中、唯一つ室温、大気圧付近での水素の吸蔵、排出が可能な元素であるV系合金は、Vを主成分とする水素吸蔵合金で、3.0mass%近い水素吸蔵量を持っている。一方、水素貯蔵原理に関しては解明されていない点がある。そこで、これらV系合金の貯蔵材料の基礎である、バナジウム単体-水素系(V-H)の第一原理シミュレーション解析を行った。

V-H系では、圧力組成等温線(PCT)曲線に、2段階のプラトー圧が現れる。このプラトーはαからβ、βからγ相への相変態を伴う2相共存状態によって説明されている(図III.2.4-(15)参照)。大気圧付近、室温付近で水素の吸、放出を可能とするプラトーはβ-γ間における2相共存状態において実現されている。水素濃度VH付近において、安定構造としてβ相が安定に存在することが、2段階プラトーの存在に必要である。また、水素占有サイトはβ相でのみ八面体サイトを占有し、α、γ相では四面体サイトを占有する。何故β相のみ八面体サイトを占有するのか、これまで明確にされていない。そこで、特にこのβ相の構造相安定性について検討した。

図III.2.4-(16)に示すように、零点振動と格子振動(フォノン)の効果을考慮することにより、BCT構造の八面体サイ

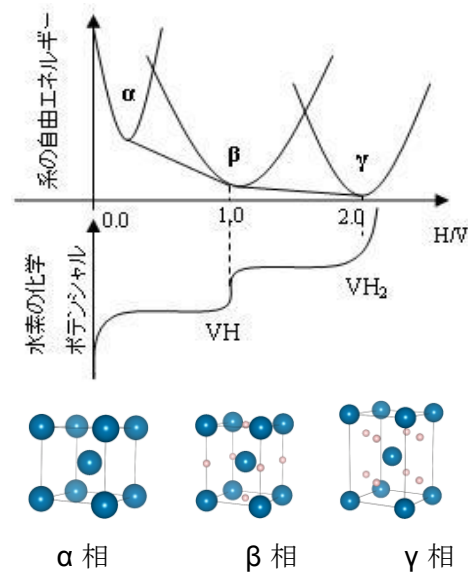


図 III.2.4-(15) V-H系の水素濃度と相変態、水素の化学ポテンシャルの概略図

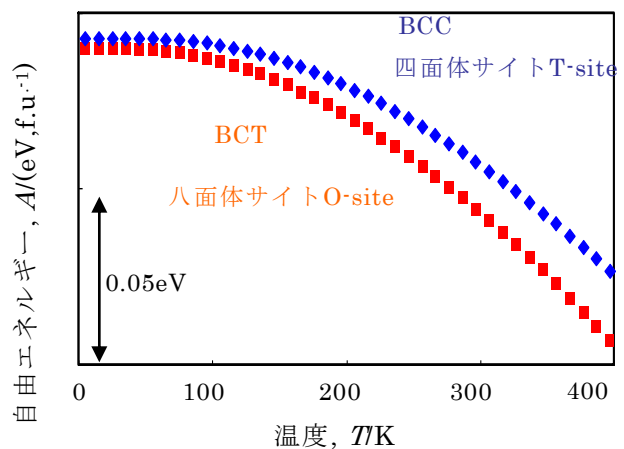


図 III.2.4-(16) 振動効果寄与と構造安定性

トが最安定となり、水素濃度が VH 付近の β 相の安定性を再現することが出来た。一方、振動効果を考慮しない場合、BCC 構造の四面体サイトが最安定となり、実験結果を説明できないことが分かった[1]。つまり、水素が八面体サイトを占有する場合の方が四面体サイトを占有する場合に比べ振動のエネルギーが小さいことが、化学組成が VH 付近である β 相の安定性を支配していると結論された。

統計熱力学による水素貯蔵量の予測：

本プロジェクトの目的の一つとして、水素貯蔵量を制御している原子論的因子の解明およびその知見を基にした貯蔵量増大に対する基礎的知見を得ることが挙げられる。水素吸蔵特性を直接現す量として、水素圧力(P)-組成(C)-温度(T)の関係を表す PCT 曲線があり、このプラトー領域の広さと温度範囲によって水素貯蔵量を知ることができる。図 III.2.4-(17) にその概念図を示す。この PCT 曲線をマクロな統計熱力学モデルを用いて再現することを試みた。まずは統計熱力学を基礎においた現象論的 PCT 曲線のモデルを構築し、パラメータフィッティングにより実験の PCT 曲線を再現することを目指した。

水素-金属間の相互作用をフェルミ-ディラック統計に従うものと仮定し、次式より水素貯蔵量を計算した[2]。

$$N = \hat{a}_s n_s^{\max} \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{1}{2} a^0(H_2) + b(e_s^0 + gN)\right] \sqrt{\frac{p(H_2)}{p^0}}} \quad (1)$$

ここで N は LaNi_5 単位格子当たりの水素原子数、 $p(\text{H}_2)$ は水素ガスの圧力を意味する。また、 α^0 , ϵ_s^0 , g , p^0 は、それぞれ、水素ガスの標準圧力での化学ポテンシャル、水素の占有するサイトエネルギー（但し、水素量ゼロに対する外挿値）、水素貯蔵によるエネルギー低下を決めるパラメータ、水素ガスの標準圧力を意味する。上式は、水素ガスと金属中の水素の化学ポテンシャルが等しいとする条件のもとに導出された。PCT 曲線は

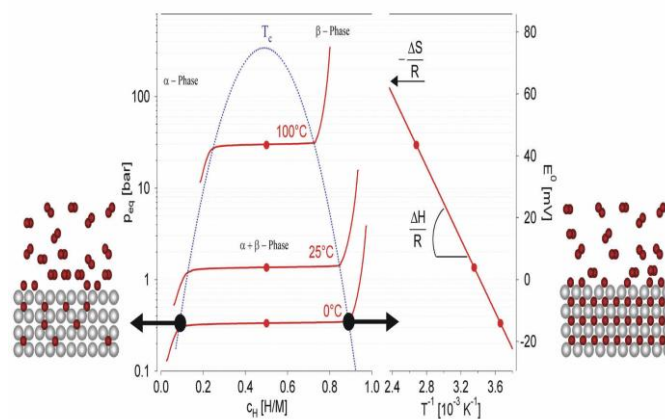


図 III.2.4-(17) 圧力組成等温線の概念図。固溶体相 (α 相、左図) と水素化物相 (β 相、右図) と 2 相共存域の存在を示す。共存域はプラトー直線で表わされる[3]

水素貯蔵によるエネルギー低下を決めるパラメータ、水素ガスの標準圧力を意味する。上式は、水素ガスと金属中の水素の化学ポテンシャルが等しいとする条件のもとに導出された。PCT 曲線は

P(H₂)とNとの関係を示したものであり、上式を解くことでPCT曲線を求めることができる。ここで、従来のモデルではフィッティングパラメータとしていた水素ガスのケミカルポテンシャル、 $\alpha^0 = \mu^0_{H_2}$ 、を理想気体の状態方程式から求めた。

$$\begin{aligned} \mu_{H_2}^0 = & -kT \ln \left(\frac{Ve}{\Lambda^3 N} \right) - kT \ln \left(\frac{T}{\sigma \Theta_r} \right) \\ & + kT \left[\frac{\Theta_v}{2T} + \ln(1 - e^{-\Theta_v/T}) \right] - kT \left[\ln \omega_{el} + \frac{D_e}{kT} \right] \end{aligned} \quad (2)$$

ここで、 $\Lambda = h/(2\pi mkT)^{1/2}$ 、 $\Theta_r = h/8\pi^2 Ik$ 、 $\Theta_v = h\nu/k$ 、 $D_e = -\varepsilon_{el}$ 、NはH₂分子数、hはプランク定数、mは水素分子の質量、Iは慣性モーメント、 σ は対称数、 ν は振動数、 ω_{el} は基底電子状態の縮退度、 ε_{el} は基底状態のエネルギーを表す。

RNi₅(R=La, Pr, Nd)化合物は六方晶の対称性を有し、吸蔵された水素の占有位置としては、八面体格子間サイトの3fと四面体格子間サイトの12n、6m、12o、4hの5種類がよく知られている。各サイトの最大占有可能水素数（(1)式中の n_s^{max} ）は、3f及び12nの合計で3（RNi₅H_n表示）

、6m、12o、4hの各サイトについては、それぞれ2, 1, 1である。

このモデルを基にLaNi₅H_N、PrNi₅H_N、及びNdNi₅H_Nの各化合物について、最も低い測定温度における実験値を再現するためのパラメータの最適化計算を行った結果を表1に示す。

それぞれの化合物について、表2に示した同一のパラメータを用いて、他の温度についても計算した結果、図III.2.4-(18)に示すように極めてよく再現できることがわかった。つまり、サイトエネルギー及び水素導入による格子膨張に起因するサイトエネルギー変化を表すパラメータ γ （式(1)参照）は定数であり、水素吸蔵に関する温度依存性は水素の化学ポテンシャル項のみに由来することを示しており、一温度で測定してパラメータの最適化を図れば、他の温度でのP-C-T曲線を予測することが可能である。この結果は、第一原理計算などで上記の各定数パラメータを決定することで任意の合金系に対するP-C-T曲線の予測が可能

表2 各合金の表示温度における P-C-T 曲線を再現するための、水素無添加 (N= 0) の場合のサイトエネルギー及び格子膨張によるサイトエネルギー変化係数の最適値。

	<i>LaNi₅</i>	<i>PrNi₅</i>	<i>NdNi₅</i>
<i>T</i> (K)	298	273	248
ε_0^0 (kJ/mole)	-8.383	-6.686	-6.340
ε_1^0	1.231	4.923	5.827
ε_2^0	1.232	-0.786	-0.600
ε_3^0	11.067	9.162	10.655
γ	-3.357	-2.923	-2.848

ことを示唆している。

正のサイトエネルギーは、 $N=0$ では占有サイトとして不利であり、水素濃度が高くなり、格子膨張によりサイトエネルギー、 $(\epsilon_s^0 + \gamma N)$ 、が負の値になって初めて水素占有サイトとして有効になることを示している。LaNi₅の場合、水素はまず3fと12nの両サイト（ともに ϵ_0^0 ）を $N=3$ まで占有する。6m及び12oの両サイトは、正のサイトエネルギー（6mは ϵ_1^0 、12oは ϵ_2^0 ）であるが、絶対値は小さいため、大きな圧力増加無しに $N=3+2+1=6$ までの水素量増加できるため幅の広いプラトー領域が現れると考えられる。一方、PrNi₅及びNdNi₅では、12oサイトまでは大きな圧力増加なしに水素量 $N=3+1=4$ まで占有するが、次の6mサイトのエネルギーが高いため、2段目のプラトーが生じると考えられる。

これらのサイトエネルギー、及び格子膨張に起因するサイトエネルギー変化を表すパラメータ γ がプラトーの高さや水素濃度範囲を決定することから、この γ を合金元素の添加等でコントロールできれば、プラトー領域を広げるための指針が得られると期待される。

以上、RNi₅(R=La, Pr, Nd)化合物系では、一化合物系につき一温度でP-C-T曲線を実測すれば他の任意の温度におけるP-C-T曲線を予測可能な計算手法を確立することができた。これ自体が、研究開発の効率化に貢献するものであるが、サイトエネルギー及び格子膨張に伴うサイトエネルギー変化を示す係数は本来第一原理計算から求めることが可能であり、今後の進

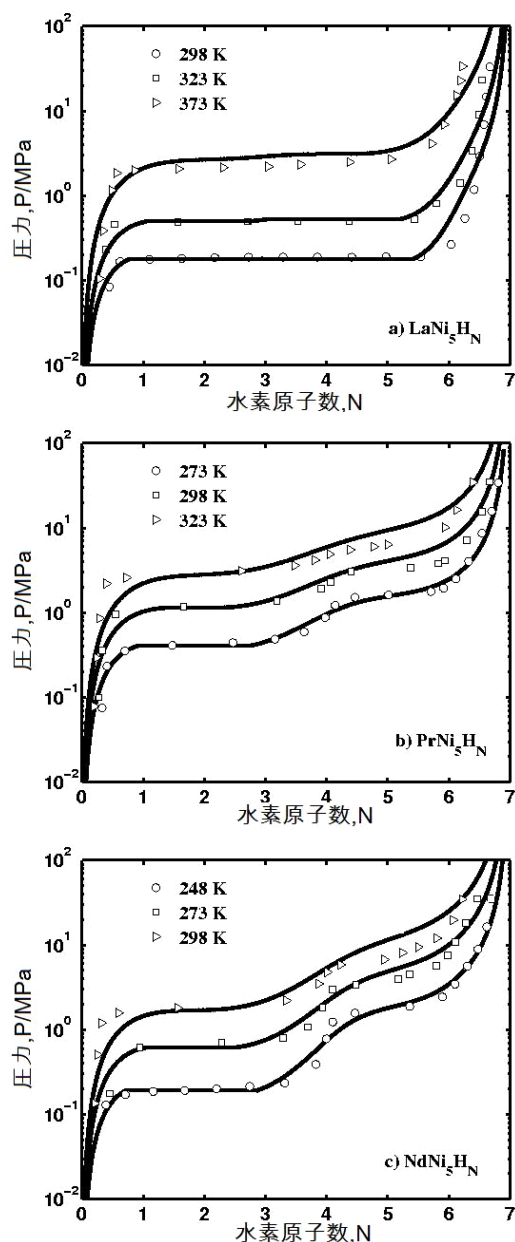


図 III.2.4-(18) PCT 曲線の統計熱力学モデルによる再現。横軸は単位胞での水素原子数, N 。縦軸は水素ガスの圧力, P 。a) LaNi₅H_N, b) PrNi₅H_N, c) NdNi₅H_N。

展により計算のみで水素吸蔵特性を予測し、材料設計を行うことで研究開発の著しい効率化を図る道を開いたといえる。[4]。

参考文献

- [1] Y. Tanaka, M. Katagiri, H. Onodera and H. Ogawa, *Int. J. Nanosci.* 8 (2009) 345.
- [2] H. Senoh, N. Takeichi, K. Yasuda and T. Kiyobayashi, *J. Alloys and Compd*, 470 (2009) 360.
- [3] A. Zuttel, *Materials Today*, 6 (2003), p24.
- [4] V. Tserolas, M. Katagiri, H. Onodera, H. Ogawa, *Inter. J. of Nanoscience*, 8, (2009), 409.

2.4.4 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

研究開発・研究内容

東北大学・金属材料研究所は「新規水素貯蔵材料のシミュレーション探索研究」の一環として、第一原理計算を主な計算手法として新規水素貯蔵材料の探索と評価を行った。

クラスレートハイドレート（包接水和物）はゲストと呼ばれる原子、分子をケージ状に取り囲む水分子のネットワーク構造を持っている（図 III.2.4-(19) 参照）。水素ハイドレートの主成分は水分子のみであり、環境負荷、資源の偏在化の問題もなく、新しい水素貯蔵材料としての利用可能性が指摘されているが、水素ハイドレート構造が高压、低温の条件下でのみ形成される欠点がある。本事業では、この形成圧力を下げ、温度を上げる添加剤（ヘルプガス）の探索を行った。材料中の水素量とハイドレート相が存在できる温度・圧力領域を示す相図を描き、ヘルプガスの有効性を示した。

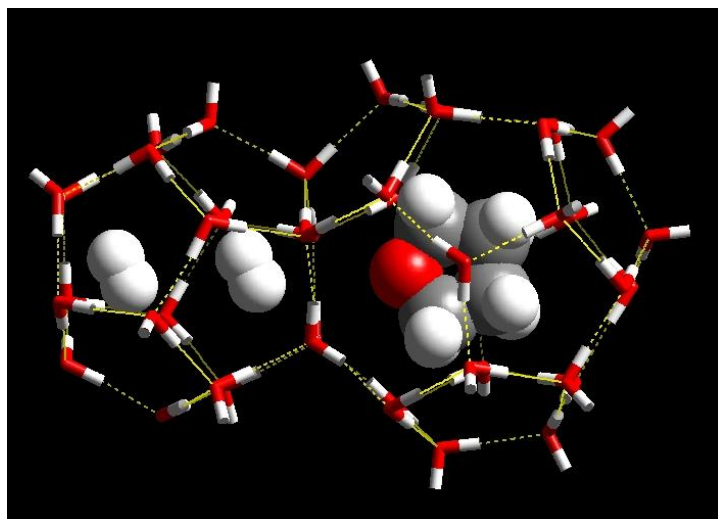


図 III.2.4-(19) ハイドレート構造 CS-II の大きいケージにテトラヒドロフラン分子を、小さいケージに 2 個の水素分子を取り込んだハイドレート構造の一部

水素ハイドレートを水素貯蔵材料として利用するためには、異なるハイドレート結晶構造ごとに安定に存在できる圧力、温度領域の情報は重要である。しかし、実験・測定による研究、多成分系クラスレートハイドレートの相図作成は大変難しく、貯蔵媒体中のゲスト成分に関する重要な情報を見落としてしまう危険性がある。本事業では、理論計算によりハイドレート構造をベースにした水素貯蔵材料の実用化に必要な情報を得ることを目的として、第一原理計算と格子力学計算を組み合わせた計算手法に基づく相図作成方法を提案し、アルゴン、メタン、キセノンのハイドレートの実験データとの比較から、計算方法の妥当性を確認した。この手法を用いて水素分子+第2ゲスト分子（候補となるヘルプガス）を貯蔵したハイドレートの相図を作成し、水素ハイドレートの形成圧力を劇的に下げることができる添加剤（ヘルプガス）を探索した。図 III.2.4-(20)

に水素+プロパン2成分系のCS-IIハイドレート構造を示す。図 III.2.4-(21) にこの水素+プロパン系ガスハイドレートにおけるプロパン濃度の化学ポテンシャルへの影響を示す。図 III.2.4-(21) では 260K の温度条件下の氷の化学ポテンシャルとハイドレート構造の化学ポテンシャルを比較し、ハイドレート構造の方が安定になる圧力を表している。プロパンを全く含まない系では 1100 気圧必要であった形成圧力が 5%のプロパンを導入することにより 50 気圧にまで低下することが明らかになった。図 III.2.4-(22) は各種プロパン量におけるハイドレート構造が形成される圧力、温度条件を示している。各温度においても 5%プロパンにより形成圧力が低下することが示された。

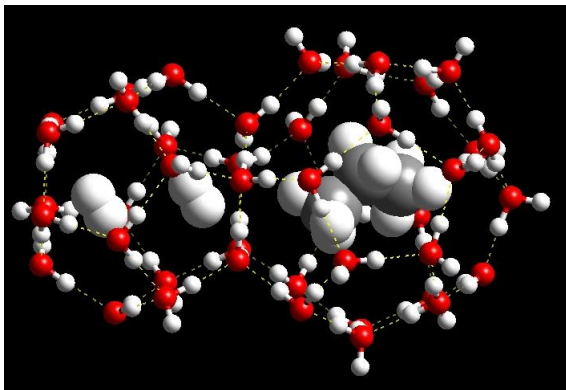


図 III.2.4-(20) 水素+プロパン2成分系のCS-IIハイドレート構造、大小2種類のケージを示す。大きいケージにプロパン分子、小さいケージに2個の水素分子を含む。

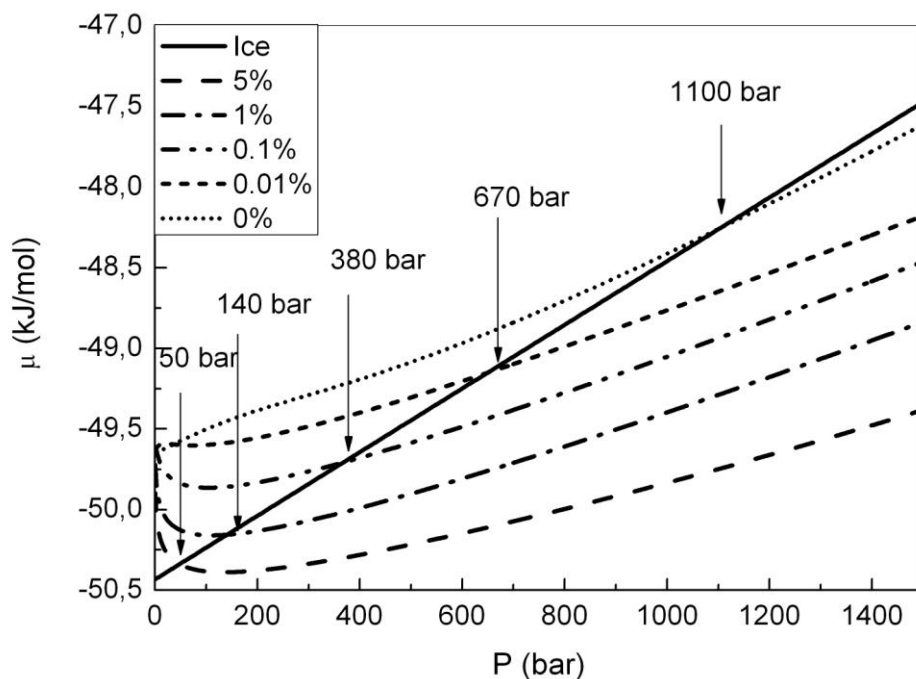


図 III.2.4-(21) 260K における 0% から 5% プロパンを含む水素+プロパン系ガス水素ハイドレートの各圧力条件下での化学ポテンシャルを示す。プロパンを 5% 含むことにより 50 気圧以上の圧力で水素ハイドレートは氷の化学ポテンシャルよりも小さい値を示す。

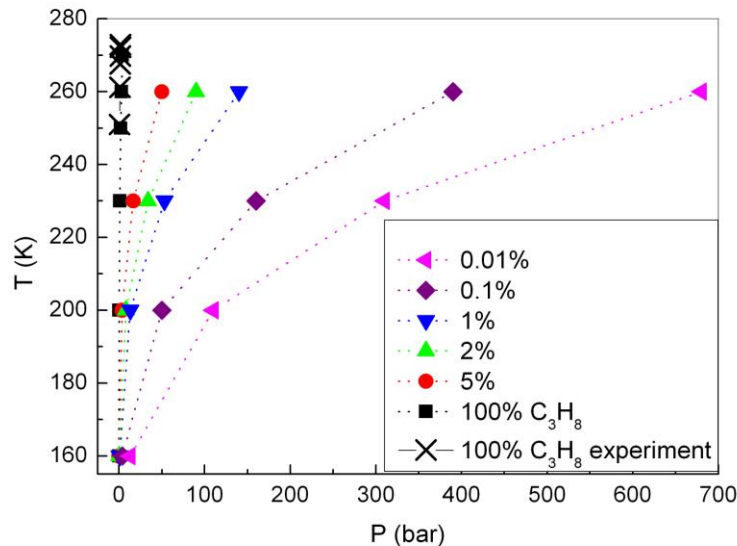


図 III.2.4-(22) 第 2 成分としてプロパンを 5% 入れた水素ハイドレートは形成圧力を上げることが可能であることが示された。×は実験結果（文献[2]）を示す。

実験報告がある水素ハイドレート結晶構造 CS-II 以外に関しても、水素ハイドレート形成と貯蔵材料としての可能性について、化学ポテンシャルと相図に基づいて議論した。さらに、水素ハイドレートをより常温、常圧でも形成可能にする微量のヘルプガス（水素ハイドレート相安定化促進剤）の探索を行い、構造安定性と吸放出温度を向上させるヘルプガス種（プロパン分子）を明らかにした。例えば、水素+メタン 2 成分系 sH 水素ハイドレート構造では、ガス相に 75%メタンを含む条件では、400bar, 200K の環境下で sH 水素ハイドレート構造は安定化することを明らかにした。

第一原理計算による電荷密度の解析から、材料中に電荷の偏りを創ることで、水素吸蔵量増加、温度特性制御が可能であることを明らかにした。これらの結果はゲストとホスト間の相互作用が本質的要素であり、水素ハイドレートの相図計算では正確に見積もるべき物性値であることを示している。また、水素ハイドレート内の水素分子間の距離は固体水素よりも短いという結果が得られた。この傾向は文献[1]とも一致している。THF 分子などのヘルプガス（促進剤）による安定性向上のメカニズムはヘルプガスと水分子との相互作用が水素分子と水分子間のものよりも強いこと、さらに、水素分子と水分子の相互作用が小さくなることをシミュレーションにより明らかにした。

有機材料を用いた水素貯蔵材料には多くの有望な候補材料がある。本事業では、異種

元素から生まれる電荷の偏りを吸着エネルギー制御に利用する手法を探るため、第一原理計算を用いて、BN 材料、有機金属構造体 Metal Organic Framework (MOF)、カーボンナノホーン、グラフェンシート、BN シート、ハイドレート等の水素吸着サイトおよび水素貯蔵能を調べた。多くの材料でアルカリ金属元素をドーピングすることにより水素貯蔵能が向上することが知られている。B₃₆N₃₆ フラーレンではリチウム、ナトリウム、カリウムを 6 個吸着させることができ、この系の水素吸着エネルギーへの影響を算定した。これらの系において、アルカリ金属元素のドーピング前後での電荷密度の増減から、水素吸着メカニズムを探った。同様の計算を、リチウムをドーピングした MOF、カーボンナノホーンの系において行い、水素分子の吸着エネルギー、水素分子が材料から離脱する温度を求めた。さらに、AlLi ナノクラスターのようにリチウムを含む合金クラスターとそれが繋がったナノ細線の吸着エネルギーを求め、高い質量比の可能性を示した。さらに、グラフェンシート、BN シートをリチウムで修飾した系、水素ハイドレートの計算結果についても検討し、これらの電荷密度変化の計算結果から吸着エネルギーに影響する要因について議論した。

水素原子の形で水素を貯蔵する材料に関しては、BN シート、グラフェンシートを主な調査対象として、水素原子の材料上の吸着サイト、吸着水素原子の STM 像のシミュレーションによる再現などを行った。

全電子混合基底法プログラム TOMBO による水素貯蔵材料の開発

TOMBO (TOhoku Mixed-Basis Orbitals *ab-initio* program) は、「全電子混合基底法」に基づいた第一原理計算プログラムであり、理論の構築からコード化までを一貫して東北大学で行っている [3-5]。全電子混合基底法とは、原子に局在した原子軌道関数 (AO) と空間的に一様に広がる平面波 (PW) で一電子波動関数を記述し、内殻電子から価電子までの全電子状態を記述することが可能である。混合基底であるため、比較的少ない平面波で電子状態を記述することができる効率的な計算手法である。図 III.2.4-(23) に、TOMBO における一電子波動関数の記述のモデルを示す。

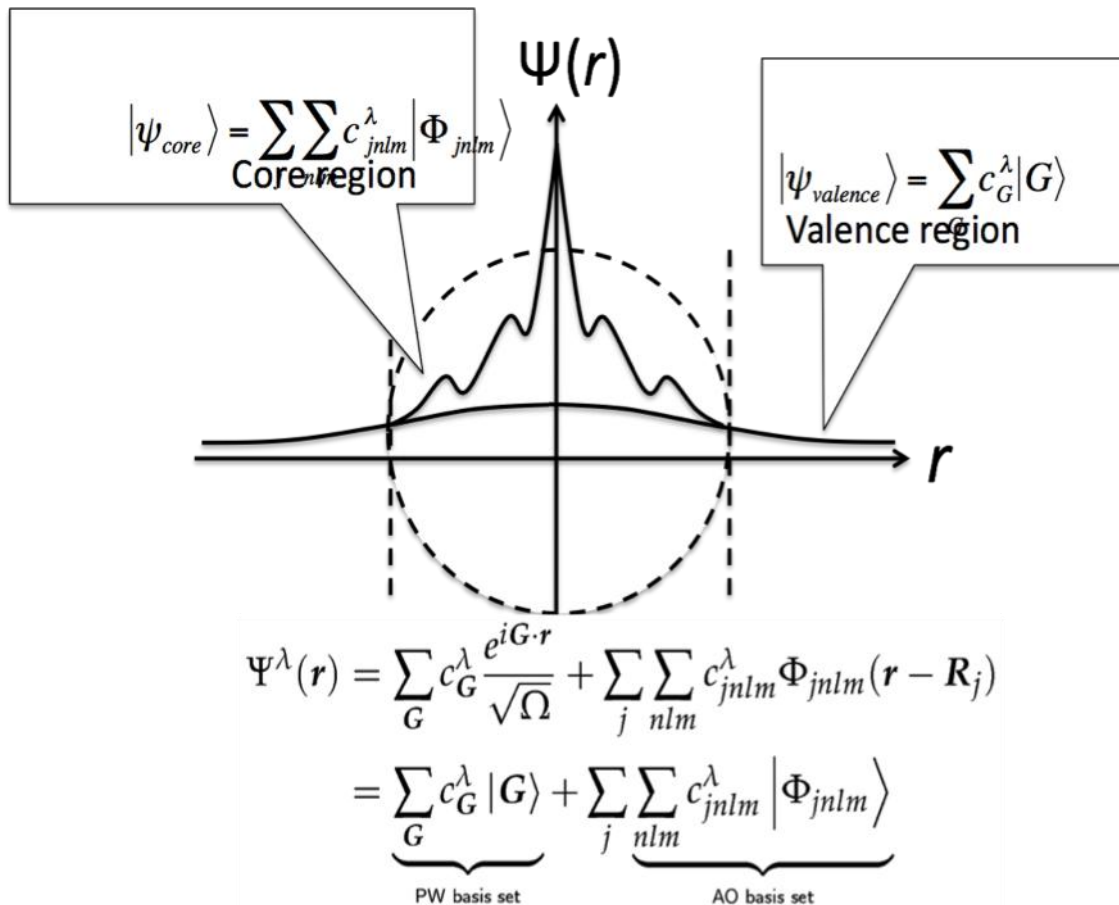


図 III.2.4-(23) TOMBO における一電子波動関数の記述

混合基底を導入することにより、TOMBO は、特に軽元素や 3d 遷移金属原子から構成される大規模系においてその威力を発揮する。例として図 III.2.4-(24) に、メタンの構造緩和に対する PW のカットオフエネルギー依存性を示す。図 (a) (b) は各々、C-H 間のボンド長、系のトータルエネルギーの PW カットオフエネルギーとの関係である。計算を行う際に、炭素の AO を 1s のみ(○)、1s および 2s(□)、1s、2s、2p について導入した場合を示した。これらの図から明らかかなように、AO として 1s、2s、2p について導入することにより平面波を小さくすることができる。水素を含む系についても、高々 300eV のカットオフエネルギーで収束させることが可能であり、標準的な平面波基底のプログラム (500-600eV) と比較しても計算時間を軽減させることが可能であることが分かる [6]。

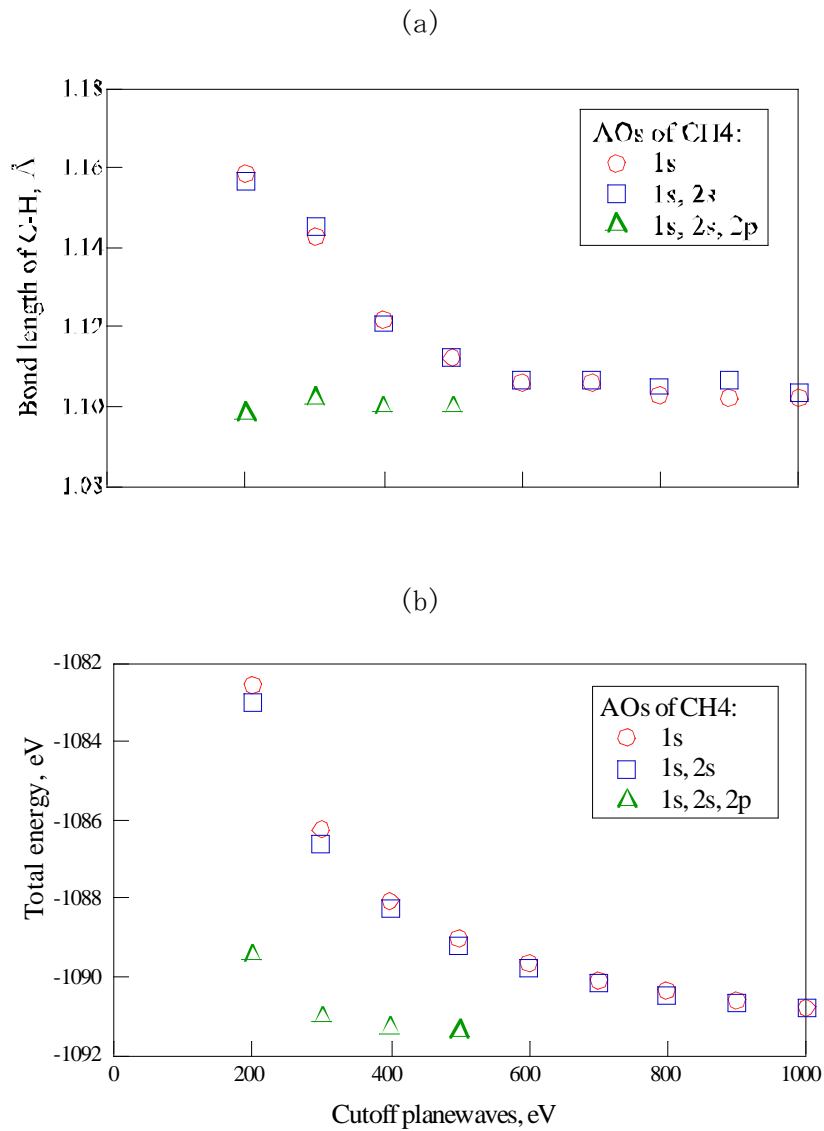


図 III.2.4-(24) TOMBO による構造緩和の cutoff エネルギー依存性

TOMBO を用いた水素貯蔵材料開発の一例として、水素貯蔵材料の候補であるカリックスアレーンの構造緩和を示す。図 III.2.4-(25) に示すように、カリックスアレーンは全体としてカップ型の構造を有している。カリックスアレーンにドーパントとして Li を導入することにより、水素分子を包接可能であることが、TOMBO を含むこれまでの理論計算により明らかにされた [7]。

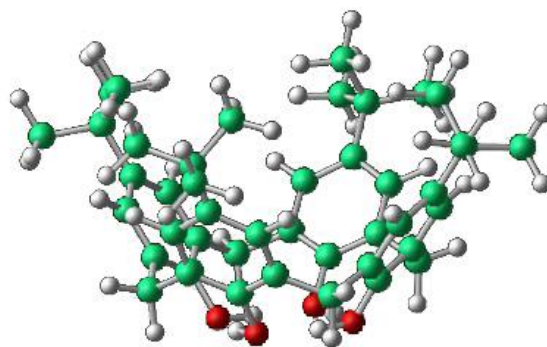


図 III.2.4-(25) TOMBO で得られた水素貯蔵材料カリックスアレーンの構造

また、TOMBO に時間依存密度半関数理論 (Time Dependent Density Functional Theory, TDDFT) を機能追加することで、励起状態を考慮した分子動力学シミュレーションを実行した。本手法によりこれまでにリチウムダイマーあるいはフッ素分子と水素分子の反応のシミュレーションを行った実績がある [8-11]。本研究の一例として、スピルオーバープロセスの初期段階である、担持金属上における水素分子の原子状水素への動的機構解明について示す。

第一原理計算による水素のスピルオーバーの研究は、これまでも多数行われている。しかし、これらの研究対象は解離した原子状水素の最終的な安定吸着位置などに対するものが多く、それらの全てが基底状態による静的な研究のみである [12-16]。本プログラムを用いる事により初めて、水素分子の解離現象における担持金属の効果を明らかにすることができた [17]。

本研究では、我々の研究グループでこれまでに明らかにした、ニッケルクラスターに水素をドーピングした際の安定構造に対する第一原理計算の結果 [18] を踏まえ、最も簡単且つ重要な系として、ニッケルダイマーを担持金属クラスターとして導入し、水素分子の解離過程のシミュレーションを行った。その際、初期条件として、ニッケルダイマーと水素分子が互いに 90 度の角度で配置する系を導入し、(1) 基底状態と (2) HOMO の電子を LUMO へ一電子励起した場合を比較した。

はじめに基底状態のシミュレーションにより、水素分子はニッケルダイマー上で振動するのみであることが確認された。一方、一電子励起の場合は、水素分子がニッケルダイマー上へ近づきながら原子状水素へと解離してゆくことが分かった (図 III.2.4-(26))。

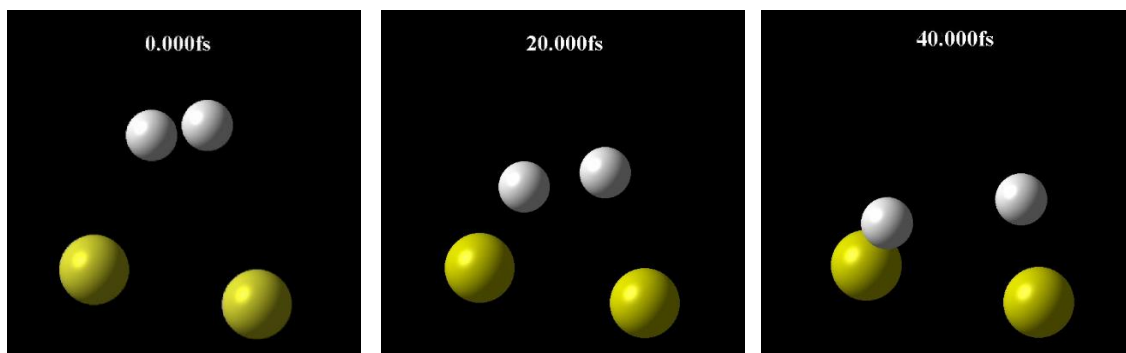


図 III.2.4-(26) 一電子励起状態における、ニッケルダイマー(黄色)における水素分子(白色)の解離過程。左から 0fs、20fs、40fs におけるスナップショット。

図 III.2.4-(27) は、一電子励起の場合について、各エネルギー軌道の期待値の時間変化と、30-32 番目のエネルギー軌道についての波動関数を示した図である。本研究での一電子励起は、アップスピンの HOMO(最高被占有軌道, Highest Occupied Molecular Orbital)を占める電子が LUMO(最低空軌道, Lowest Unoccupied Molecular Orbital)へ励起された状態を初期状態として用いたものである。本系では HOMO は 30 番目の軌道、LUMO は 31 番目の軌道に対応している。

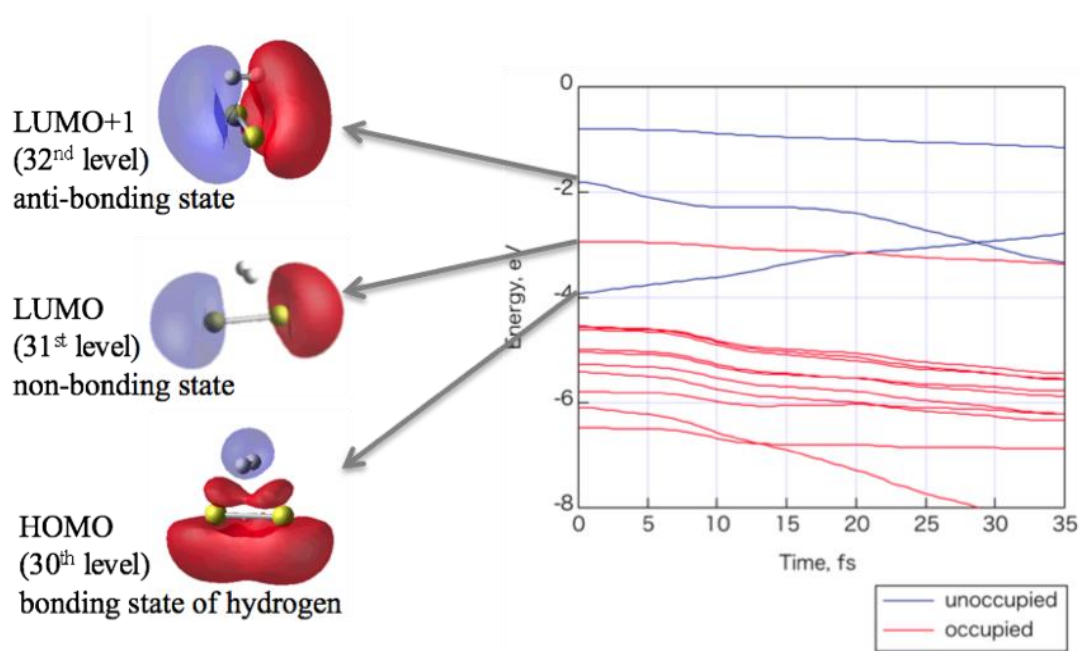


図 III.2.4-(27) エネルギー期待値の時間発展と、30-32 番目のレベルの波動関数

図 III.2.4-(27)のうち右図は、赤線が被占有軌道、青線が空軌道を示しているが、シミュレーション開始後、約 20fs で 30 番目と 31 番目の軌道が交差し、電子が高い軌道 (originally LUMO) から低い軌道 (originally HOMO) へと移行することが分かる。この際に水素分子が解離し原子状水素となる。

また、波動関数の図は、青と赤の領域で符号が異なり、水素周囲の波動関数から、HOMO はボンディング状態、LUMO はノンボンディング状態、LUMO+1 番目のレベルはアンチボンディング状態であることが分かる。ニッケルダイマーを導入することで、水素をアンチボンディング状態まで励起させることなく、ノンボンディング状態への励起で水素分子が解離することが明らかになった。

今後は、クラスターの元素種、サイズ等を系統的に変化させることで、これらの担持金属クラスターの効果を調べる予定である。さらに、本系に水素貯蔵材料を追加し長時間側のシミュレーションを行うことで、最終年度は解離した原子状水素の振る舞いを調べている。本研究に示すように、TOMBO により、軽元素から構成される新規水素貯蔵材料の大規模シミュレーションに展開することが可能である。

参考文献：

- [1] Konstantin A. Lokshin, Yusheng Zhao, Duanwei He, Wendy L. Mao, Ho-Kwang Mao, Russell J. Hemley, Maxim V. Lobanov, Martha Greenblatt, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 125503 (2004).
- [2] K. Yasuda and R. Ohmura, *J. Chem. Eng. Data* **53**, 2182 (2008).
- [3] T. Ohtsuki, K. Ohno, K. Shiga, Y. Kawazoe, Y. Maruyama, and K. Masumoto, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 967 (1998).
- [4] K. Ohno, K. Esfarjani, and Y. Kawazoe, *Computational Materials Science: From ab initio to Monte Carlo Methods*, Springer Series in Solid-State Sciences Vol. 129 (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1999), 42-46.
- [5] M. S. Bahramy, M.H.F. Sluiter, and Y. Kawazoe, *Phys. Rev.* **B73**, 045111 (2006).
- [6] 佐原亮二, 水関博志, 川添良幸, ナノ学会会報第 9 巻, 45(2011).
- [7] N. S. Venkataramanan, R. Sahara, H. Mizuseki, and Y. Kawazoe, *Computational Materials Science* **49**, S263 (2010).
- [8] T. Sawada, J. Wu, Y. Kawazoe, and K. Ohno, *Trans. Mater. Res. Soc. Jpn.* **29**, 3727 (2004).
- [9] T. Sawada, Y. Kawazoe, and K. Ohno, *Sci. Tech. Adv. Mater.* **5**, 689 (2004).
- [10] T. Sawada and K. Ohno, *Chem. Phys. Lett.* **405**, 234 (2005).
- [11] Y. Kodama and K. Ohno, *Appl. Phys. Lett.* **96**, 034101 (2010).
- [12] Y. Li, F. H. Yang, and R. T. Yang, *J. Phys. Chem. C* **111**, 3405 (2007).
- [13] Galina P. Petrova, Georgi N. Vayssilov, and Notker RÅNosch, *J. Phys. Chem. C* **111**, 14484 (2007).
- [14] L. Chen, A. C. Cooper, G. P. Pez, and H. Cheng, *J. Phys. Chem. C* **111**, 18995 (2007).

- [15] Xianwei Sha, M. Todd Knippenberg, Alan C. Cooper, Guido P. Pez, and Hansong Cheng, *J. Phys. Chem. C* **112**, 17465 (2008).
- [16] George M. Psofogiannakis and G. E. Froudakis, *J. Phys. Chem. C* **113**, 14908 (2009).
- [17] R. Sahara, H. Mizuseki, Marcel H. F. Sluiter, K. Ohno, and Y. Kawazoe, under review.
- [18] N. S. Venkataramanan, R. Sahara, H. Mizuseki, and Y. Kawazoe, *J. Phys. Chem. C* **112**, 19676 (2008).

2.4.5 水素貯蔵物質の電子状態と動的挙動解析

広島大学

⑤-1.水素貯蔵物質の電子状態と構造安定性の解明

・研究の目的と概要

本項目では、遷移金属系水素貯蔵材料に関わる基本物質に関して、第一原理手法により電子状態を調べ、物質設計指針を構築することを目的としている。

平成 22 年度は、 FeH_x 、 CoH_x 、 NiH_x などの遷移金属水素化物系について、その電子状態、結合状態、構造安定性、相安定性を第一原理手法に基づき解析した。平成 23 年度は、これらの遷移金属水素化物系に対して高圧下での水素の安定性や物性の変化を調べ、新規水素貯蔵物質の可能性を探索した。

プロジェクトを通して、広島大学の石松直樹氏（「研究開発項目：水素と材料の相互作用の実験的解明」）とは遷移金属水素化物の電子状態と磁性に関して数多くの議論を重ねている。また、計算科学グループ（特に大阪大学グループ）との議論も有効であった。

・遷移金属水素化物の電子状態：一般的性質

遷移金属水素化物では遷移金属の spd 軌道と水素の 1s 軌道との混成により、水素原子あたりほぼ一つ分の電子が d バンドを余分に埋めた電子状態が実現される。図 III.2.4-(28) に面心立方 (fcc) 構造の Ni と NaCl 構造の NiH の計算された状態密度を示す。水素を含まない純粋な Ni の場合には、ほぼ s^1d^9 の電子配置が実現され状態密度の高いところにフェルミ準位が位置し、Stoner 条件を満たすことから強磁性状態が安定化されている。一方、NiH では Ni-spd 軌道と H-1s 軌道の混成によりその結合状態が低エネルギー領域に現れ、またその反結合状態がエネルギー的に高い位置にくるため、結果的に見かけ上状態密度の高い d バンドがほぼ一つ分多く占有された状況が起こる。また、遷移金属間距離が広がることに起因して近隣 d 軌道間の飛び移り積分が小さくなり d バンド幅が狭くなる。これらは、NiH では Stoner 条件を満たさないことから強磁性とはならず、それ以外の水素化物では磁気秩序の安定性に優位に働くことになる。一般に、遷移金属の構造と磁性は d 電子数に強く依存していることがよく知られており、その変化を系統的に調べるため、本研究では遷移金属水素化物の中で FeH、CoH、NiH を取り上げ、その電子状態と構造安定性を第一原理計算に基づき解析した。

・Fe 水素化物の電子状態

体心立方 (bcc) 構造の強磁性 Fe は水素高圧下で二重六方最密 (dhcp) 構造の強磁性 FeH に転移する。dhcp 構造では Fe に 2 種類の結晶学的原子位置 (2a、2c サイト) が存在し、水素原子位置が微妙に理想位置より変位を起こすことにより、2 種類の Fe の電子状態に差異が生じ、磁性 (スピン磁気モーメント、内部磁場) に変化をもたらすことを明らかにした。図 III.2.4-(29) は水素位置座標の関数として計算された水素原子に働く力、Fe の 2a 及び 2c サイトにおけるスピン磁気モーメント及び内部磁場を示す。実験的に得られている水素位置は $z(\text{H})=0.882$ であり、計算の与える平衡位置 $z(\text{H})=0.880$ はこれ

をよく再現している。また、理想的な水素位置 $z(\text{H})=0.875$ では Fe の 2a 及び 2c サイトのスピนมーメントや内部磁場に大きな違いはないが、平衡位置ではサイトによる違いに導いていることが明らかとなった。内部磁場のサイトによる差異はメスバウアー実験とつじつまが合う。

FeH に圧力をかけると室温において約 30GPa で強磁性が消失することがメスバウアー実験及び磁気円二色性実験より報告されている。ここでは、格子定数を変化させた第一原理計算に基づき状態方程式を求めることから強磁性消失の圧力を理論的に求め 48GPa を得た。計算結果は絶対零度での転移圧力に対応し、実験結果より大きな値となることは定性的に合理的である。bcc Fe では 14GPa で強磁性が消失することが知られており水素化により強磁性の安定領域が広がったことが明らかになった。

・Co 水素化物の電子状態

六方最密 (hcp) 構造の強磁性 Co は、水素圧下でその格子間位置に水素が順に入りいくつかの組成中間相を経て fcc 基の CoH に至る。CoH_x に対しては、hcp Co を出発点とし H 原子層を八面体位置に順次挿入した $x=0, 1/4, 1/3, 1/2, 1$ の 5 つの構造と fcc Co および CoH を考慮して第一原理計算を行った。hcp 基の CoH_x では構造の自由度が多く、内部自由度に伴う構造パラメータの最適化を実行した。考慮した全ての構造で強磁性解が安定に存在した。また、水素固溶による磁気モーメントの減少率は hcp CoH_x では $0.27\mu_{\text{B}}$ /水素原子であった。さらに $x=1$ においては hcp 基よりも fcc 基 CoH の方がエネルギー的に安定であることが分かった。

圧力下における相安定性に関して、CoH に対して fcc 基構造と hcp 基構造のエネルギーを比較したところ、常圧から 40GPa までの範囲で fcc 基構造の方が hcp 基構造より安定である結果を得た。これは実験結果と一致する。しかしながら、水素濃度の異なる CoH_x に対して生成エンタルピーを計算したところ 20GPa までの範囲では水素化物は生成されない結果を得た。これは明らかに実験結果とは矛盾する。現在、水素気体をファンデアワールス気体として扱う補正の効果を取り入れて、安定性を解析しているところである。

・Ni 水素化物の電子状態

NiH_x に対しては、fcc Ni を出発点とし八面体位置に水素原子を逐次挿入することで $x=0, 1/4, 1/2, 3/4, 1$ の 5 つの構造を用意した。それぞれの構造で、常磁性解および強磁性解を求め構造パラメータの最適化を行った。水素を固溶させることで磁性は大きく変化し、 $x=1/4$ においてさえも自己無撞着強磁性解を得ることが困難となり固定モーメント法を併用した。水素固溶量を増やすことで体積は単調に増加するが体積弾性率はほとんど変化しない ($\sim 200\text{GPa}$) ことがわかった。Ni あたりの磁気モーメントはおおよそ $0.8\mu_{\text{B}}$ /水素原子の割合で減少し、 $x=3/4$ では強磁性消失寸前であることがわかった。NiH では強磁性の解は存在しない。これは水素原子の 1s 軌道と Ni の軌道の結合状態が形成された結果、Ni の sp 軌道状態の大部分はフェルミ準位より上の非占有状態に押し出され、見かけ上 d バンドの占有数が増えることに起因する (図 III.2.4-(28) 参照)。NiH における状態密度では、H-Ni 結合・反結合軌道がフェルミ準位をまたいで大きく分裂しており、かなり安定な状態であることが予想される。実際、 $E(\text{Ni})$ を fcc Ni の平衡体積での全エネルギー、 $E(\text{H}_2)$ を孤立水素分子の平衡結合距離での全エネルギー、 $E(\text{NiH}_x)$ を NiH_x の平衡体積での全エネルギーとして、NiH_x の生成熱を $Q(x) = E(\text{NiH}_x)$

– $E(\text{Ni}) - x E(\text{H}_2)/2$ で定義し計算すると、 $Q(x=1)$ で -5mRy となった(図 III.2.4-(30) 青線)。これは常圧絶対零度では、考慮した構造のなかで NiH がエネルギー的に最も安定であることを示す。これは常圧で Ni 相が安定である実験結果を説明できない。圧力下での相安定性を調べるため、体積とエネルギーの関係から状態方程式を決定し、エンタルピー $H=E+pV$ を求めたが、計算されたエンタルピーも同様の傾向を示し、常圧から 6GPa までの範囲では NiH が最も安定であった。

以上の議論に含まれていない重要な効果は、零点振動エネルギーと有限温度に伴う水素気体の運動エネルギー補正の効果である。前者の効果に関して、格子振動及び分子振動を計算し Q に対して補正を行ったがほとんど効果はなかった。一方、水素気体をファンデアワールス気体として扱うことにより水素分子のエネルギーは大きく補正を受け、常温常圧では Ni 相が安定である結果を得た(図 III.2.4-(30) 赤線)。この議論を加圧条件下に拡張し、生成エンタルピーを圧力の関数として計算すると、約 60MPa で $x=1$ に対する生成エンタルピーは正から負に転じ NiH へ相転移することを説明することができた。

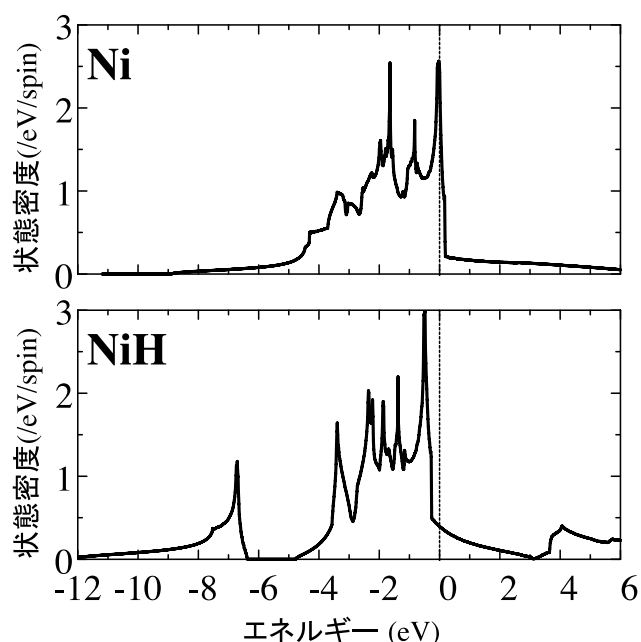


図 III.2.4-(28) fcc 構造の Ni と NaCl 構造の NiH に対して計算された状態密度。それぞれのフェルミ準位をエネルギーの原点に採っている。NiH では Ni-4sp 軌道と H-1s 軌道の結合状態が -12eV から -6eV に現れると同時に、Ni の場合と比較して Ni-3d バンドが見かけ上ほぼ 1 つ余分に占有された電子状態が実現される。また、Ni 原子間距離の拡大に伴い d バンド幅が狭くなる様子が見られる。

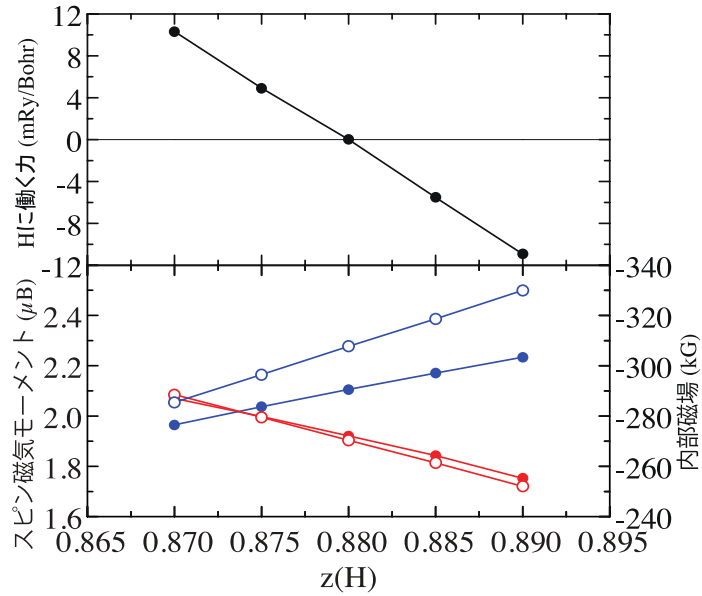


図 III.2.4-(29) dhcp 構造の FeH に対して計算された水素位置座標 $z(H)$ の関数としての水素原子に働く力、Fe の 2a 及び 2c サイトでのスピン磁気モーメントと内部磁場。●は水素原子に働く力を、●及び●はそれぞれ Fe の 2a 及び 2c サイトのスピン磁気モーメントを、○及び○はそれぞれ Fe の 2a 及び 2c サイトの内部磁場を示す。

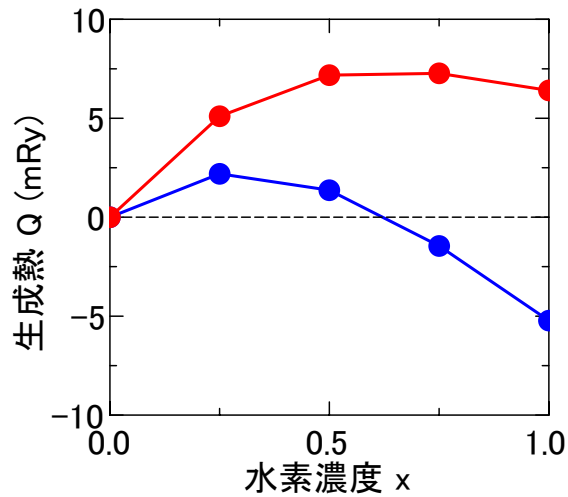


図 III.2.4-(30) NiH_x に対して計算された生成熱 $Q(x) = E(NiH_x) - E(Ni) - x E(H_2)/2$ 。青は第一原理計算の全エネルギー結果。赤は水素気体に対するファンデアワールス気体の補正を加えた結果。

⑤-2.水素貯蔵物質の動的解析

・研究の目的と概要

本研究は、軽元素系水素貯蔵物質の水素吸蔵・放出過程の機構を、第一原理計算により解析し、水素貯蔵物質設計の指針を微視的視点から提示することを目的としている。平成 22 年度は、優れた水素貯蔵物質の候補であるアルカリ金属水素化物・アンモニア系の水素放出過程を第一原理計算により解析した。平成 23 年度は、リチウム・窒素・水素による水素貯蔵系として有望なりチウム水素化物・アンモニア系およびリチウム水素化物・リチウムアミド系に対する触媒作用の微視的機構を解明し、更なる反応率向上の指針を得るために、これらの系に対する塩化チタンの触媒作用を第一原理計算により解析した。

アルカリ金属水素化物 MH とアンモニア NH₃ からの水素放出反応の解析としては、第一原理計算により水素放出反応の再現を試み、そのアルカリ金属 M(=Li, Na, K)依存性を調べることにより、アルカリ金属による反応性の違いとその起源を微視的視点から明らかにした。また、同様にしてリチウム水素化物 Li_nH_n クラスタと NH₃ からの水素放出反応の再現も試み、クラスタサイズ n(=1-4)依存性とその起源を微視的視点から明らかにした。

触媒作用の解析としては、LiH・NH₃ 系および LiH・リチウムアミド LiNH₂ 系への触媒として有効な塩化チタン TiCl₃ の触媒作用を調べた。具体的には、これらの系の反応過程において現れる LiH、NH₃、LiNH₂ と TiCl₃ との相互作用を第一原理計算により解析した。

・アルカリ金属水素化物 M₂H₂ クラスタとアンモニア NH₃ の反応

リチウム金属水素化物 LiH とアンモニア NH₃ による水素貯蔵系 LiH+NH₃←→LiNH₂+H₂ は、理論的には 8.1mass%の水素を貯蔵することができる。この系は水素放出反応が発熱反応であり常温で容易に反応が進行し、逆反応も比較的低温低圧で進行する。ただし、LiH と NH₃ の反応率は必ずしも高くない。一方、LiH の Li を他のアルカリ金属に変えることによりこの系の反応率は上昇し、アルカリ金属水素化物 MH と NH₃ の反応率は M=Li, Na, K の順に高くなっていくことが実験的に知られている。第一原理計算の結果、MH と NH₃ の反応のポテンシャルバリアが M=Li, Na, K の順に低くなり、また NH₃ 側の H の正の電荷が M にほとんど依らない一方で MH 側の H の電荷は M=Li, Na, K の順により大きな負の値を取ることが明らかになった。

図 III.2.4-(31) に、M₂H₂+NH₃ 系からの水素放出反応におけるポテンシャルエネルギーの M 依存性を示す。ここで水素放出過程は M₂H₂ 側の H と NH₃ 側の H 間の距離を縮めることにより見積もられ、M の座標は MH 結晶中における座標で固定した。図の横軸は H-H 間距離で図右側が反応前、左側が反応後である。図より、反応のポテンシャルバリア、すなわち反応過程におけるエネルギーの最大値は M=Li, Na, K の順に低くなり、またエネルギーが最大値を取る H-H 間距離も M=Li, Na, K の順に長距離側にシフトしていることが分かる。これらの結果は、MH と NH₃ の反応が Li, Na, K の順に起こりやすくなることを示し、実験による反応率の M 依存性とコンシステントである。

図 III.2.4-(32) に、反応の過程における M₂H₂ 側の H、及び NH₃ 側の H の電荷の H-H 間距離依存性を示す。図より、反応前(図右側)においては、M₂H₂ 側の H の電荷が M に依存

し、 $M=Li, Na, K$ の順により大きな負の値を取るのに対し、 NH_3 側のHの電荷は正の値を取りM依存性は小さい。 M_2H_2 側のHの電荷のM依存性は、Mの電気陰性度がLi、Na、Kの順に小さくなることとコンシステントである。これらの結果から、 M_2H_2 と NH_3 の反応においては、H-H間のクーロン相互作用がLi、Na、Kの順に大きくなることによって反応のエネルギーバリアを下げることに寄与していることを明らかにした。

・リチウム水素化物 Li_nH_n クラスタとアンモニア NH_3 の反応

$LiH+NH_3$ 水素貯蔵系の性能向上のためには、LiH結晶の表面と NH_3 が実際にどのように反応しているかを知ることが有益であるが、シミュレーションで再現可能な清浄なLiH表面は、 NH_3 とは容易には反応しない。 NH_3 が実際にどのようにLiH表面と反応するかに関する洞察を得る方法の一つは、LiHの不規則な表面に対応するモデルとして Li_nH_n クラスタを考え、このクラスタと NH_3 の反応のクラスタサイズ依存性を調べることである。第一原理計算の結果、反応過程におけるポテンシャルエネルギーの変化がクラスタサイズに強く依存し、 $n=1-4$ のクラスタサイズにおいては $n=2$ の場合に反応のエネルギーバリアが最も小さくなることを明らかにした。

図 III.2.4-(33) に、 $Li_nH_n+NH_3$ からの水素放出過程におけるポテンシャルエネルギーのn依存性を示す。図より、反応のポテンシャルバリアは $n=2$ の時最小値を取り、 $n=2$ から外れるほどより大きな値を取ることが分かる。このことから、実際の反応においては、 Li_2H_2 クラスタに相当するような表面構造の箇所で反応が容易に進行すると考えられる。

図 III.2.4-(34) に、反応の過程における Li_nH_n 側のH、及び NH_3 側のHの電荷のH-H間距離依存性を示す。図より、反応前（図右側）においては、 Li_nH_n 側のHの電荷がnに依存し、 $n=2$ の時に最も大きな負の値を取るのに対し、 NH_3 側のHの正の電荷のn依存性は小さい。これらの結果から、 Li_nH_n 側のHの電荷はクラスタサイズに依存し、H-H間のクーロン相互作用が反応のエネルギーバリアを下げることに寄与していることを明らかにした。

・リチウム・窒素・水素系に対する塩化チタンの触媒作用

リチウム水素化物LiHとアンモニア NH_3 による水素貯蔵系、LiHとリチウムアミド $LiNH_2$ による水素貯蔵系に対する触媒としては、塩化チタン $TiCl_3$ が有効であることが実験的に知られているが、触媒作用の微視的機構は明らかになっていない。本研究では、触媒作用の微視的機構を理論的に明らかにすることを目的として、まず $TiCl_3$ とLiH、 $LiNH_2$ 、 NH_3 の相互作用を調べた。 $TiCl_3$ とLiHの相互作用については、 Li_2H_2 クラスタと Ti_2Cl_6 クラスタからなる系、および $Li_{72}H_{72}$ スラブと Ti_2Cl_6 クラスタからなる系に対する第一原理計算を行うことにより、 $TiCl_3$ はLiHを強く吸着し($\Delta E=-2.5eV$ 程度)、 $TiCl_3$ とLiHの相互作用は $Ti^{\delta+}-H^{\delta-}$ 間の相互作用が主であることを明らかにした。ここで、 $Ti^{\delta+}-H^{\delta-}$ 間の距離はTi-Cl間の距離より短く、相互作用は共有結合的な要素を含みつつも静電相互作用による面が大きい。また、 $TiCl_3$ と NH_3 の相互作用については、 NH_3 分子と Ti_2Cl_6 クラスタからなる系に対する第一原理計算の結果、 $TiCl_3$ は NH_3 を強く吸着し($\Delta E=-1.7eV$ 程度)、 $TiCl_3$ と NH_3 の相互作用は $Ti^{\delta+}-N^{\delta-}$ 間の相互作用が主であることを明らかにした。 $Ti^{\delta+}-N^{\delta-}$ 間についても、原

子間距離は Ti-Cl 間より短く、相互作用もやや共有結合性を含んだ静電相互作用となっている。

図 III.2.4-(35) に、 $\text{Li}_{72}\text{H}_{72}$ スラブと Ti_2Cl_6 クラスタからなる系の常温(300 K)での分子動力学(MD)シミュレーションにおける、LiH スラブを構成する Li 原子および H 原子の z 座標 (LiH 表面に垂直な方向) の時間変化を示したものである。 Ti_2Cl_6 クラスタは時間 3 ~ 4ps 程度でスラブの上側に吸着するが、その後 LiH スラブ表面の原子のいくつかがスラブ表面から浮き上がっていることが分かる。これは、LiH スラブ表面の原子が Ti_2Cl_6 によって吸い上げられているためであるが、LiH スラブ表面からの浮き上がりは Li 原子よりも H 原子においてより顕著である。清浄な LiH 表面は NH_3 とは容易に反応しないが、 TiCl_3 の LiH 表面に対するこれらの効果は、LiH 表面の反応性向上に寄与すると考えられ、 TiCl_3 の NH_3 吸着効果と併せて NH_3 分子を乱れた LiH 表面の近くに存在させ、 H_2 放出反応を促進すると考えられる。現在、 LiNH_2 に対する TiCl_3 の効果について解析中である。

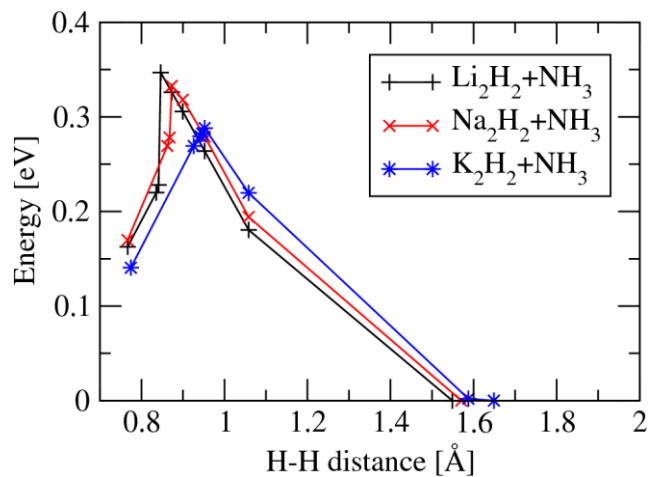


図 III.2.4-(31) $\text{M}_2\text{H}_2+\text{NH}_3$ 系のポテンシャルエネルギーの H-H 間距離依存性。
エネルギーの原点は反応前の最安定点 (図右側)。

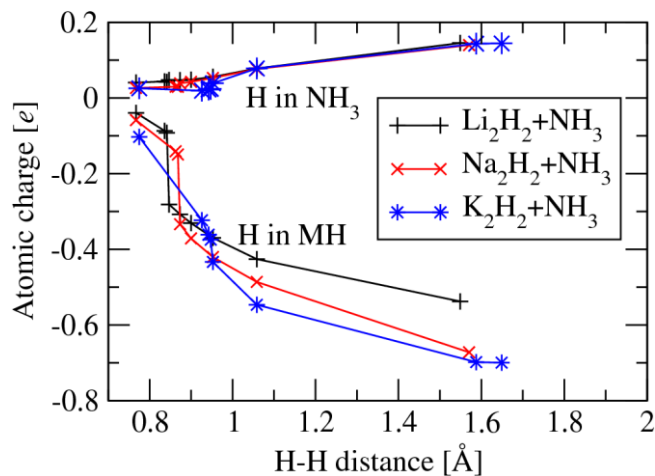


図 III.2.4-(32) $\text{M}_2\text{H}_2+\text{NH}_3$ 系の H の電荷の H-H 間距離依存性。

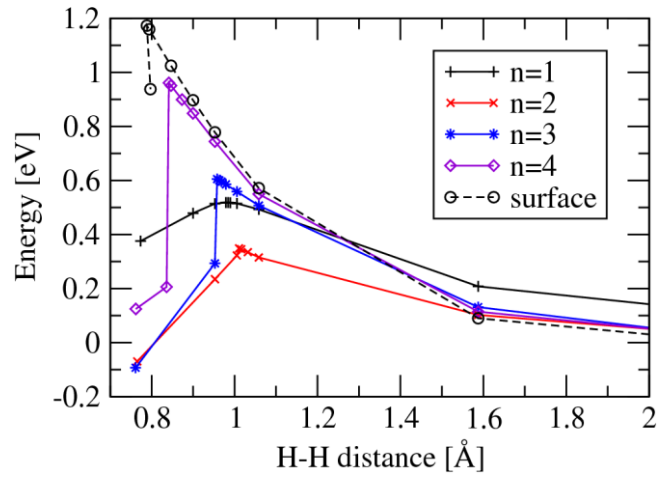


図 III.2.4-(33) $\text{Li}_n\text{H}_n + \text{NH}_3$ 系のポテンシャルエネルギーの H-H 間距離依存性。
エネルギーの原点は反応前の最安定点 (図右側)。

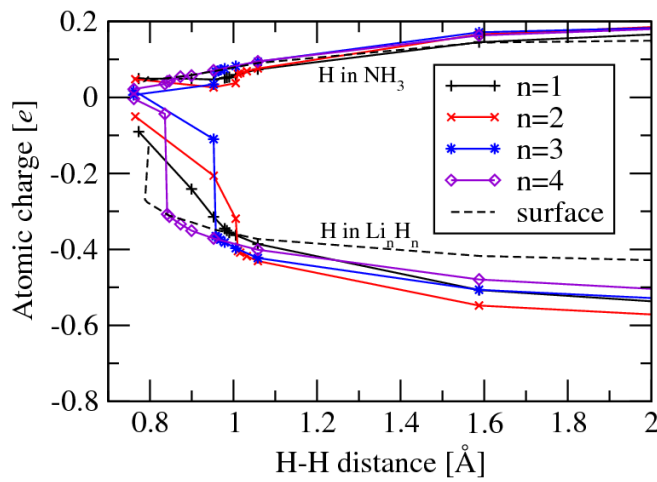


図 III.2.4-(34) $\text{Li}_n\text{H}_n + \text{NH}_3$ 系の H の電荷の H-H 間距離依存性。

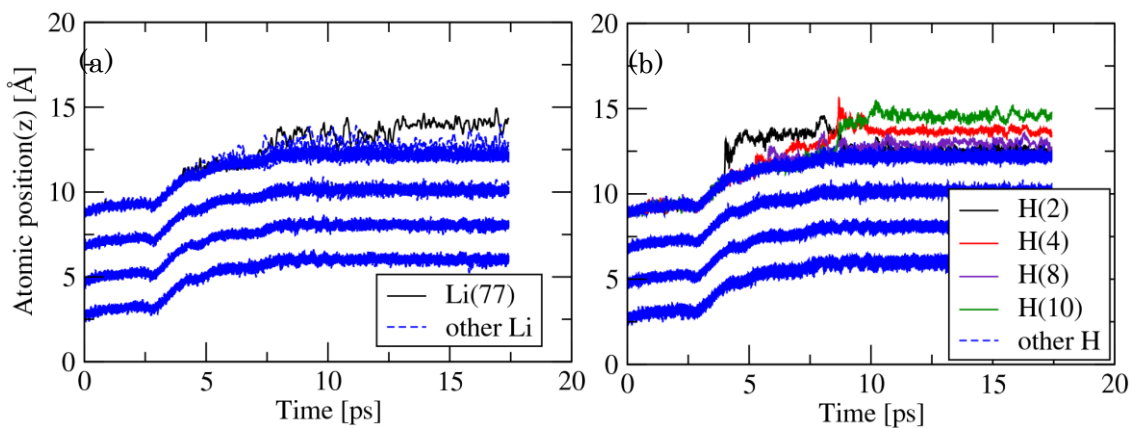


図 III.2.4-(35) $\text{Li}_{72}\text{H}_{72}$ スラブを構成する (a) Li 原子および (b) H 原子の z 座標
(スラブ表面に垂直な方向) の時間変化。 Ti_2Cl_6 クラスタは時刻 3 ~ 4ps で
グラフ上側から $\text{Li}_{72}\text{H}_{72}$ スラブ表面に吸着。

2.4.6 ゼオライト鑄型炭素をモデル物質とするスピルオーバー水素貯蔵メカニズムの解明

国立大学法人 東北大学

研究開発項目 4-6-1. 細孔径およびグラフェンの曲率がスピルオーバー貯蔵に及ぼす影響の解明

グラフェンの湾曲がスピルオーバー貯蔵に及ぼす影響の検討に取り組んだ。まず、グラフェンの湾曲度の自在制御に取り組んだ。具体的には、ゼオライト鑄型炭素 (ZTC) への応力印加によるグラフェンの湾曲度制御を検討し、これを可能とする技術開発に成功した。湾曲度を制御した状態でのスピルオーバー貯蔵量測定までは至らなかったが、応力印加による ZTC の細孔径とグラフェン曲率の可逆制御は世界初の技術である。

炭素材料の細孔径は水素の物理吸着量に大きく影響する。また、グラフェンの曲率はスピルオーバー貯蔵に影響すると考えられる。したがって、「物理吸着+スピルオーバー」による貯蔵量を最大化するには、これらの最適化が必要であるが、従来の炭素材料では 2 nm 以下の領域でグラフェンの曲率と細孔径を自在に制御することは不可能であった。我々は ZTC が幅 0.74~1.2 nm の帯状ナノグラフェンネットワーク構造から成り、均一な細孔 (径: 1.2 nm) を持つことに着目し、機械的圧縮により帯状ナノグラフェンの曲率と細孔径を可逆的に制御することを試みた。

図 III.2.4-(36) に CO₂ 吸着等温線を示す。ZTC に 100 MPa の応力を印加した状態では (ZTC-100MPa)、CO₂ 吸着量が大幅に増大した。これは細孔径が 1.2 nm から 0.88 nm へと小さくなり、細孔内のポテンシャル井戸が深くなったためである。さらに、応力を解放すると (ZTC-0MPa-解放) CO₂ 吸着量が元の値に戻り、細孔径が元の 1.2 nm に可逆的に戻ったことがわかる。

以上の結果は、ZTC が応力印加に対し弾性変形することを示している。弾性変形はグラフェンの曲率増加を伴うため、本手法を用いれば、ZTC の細孔径とグラフェンの曲率を自在に制御することができる。以上、多孔性炭素材料の細孔径とグラフェンの曲率を単に応力印加するだけで自在に変化させる手法を世界で初めて示すことができた。

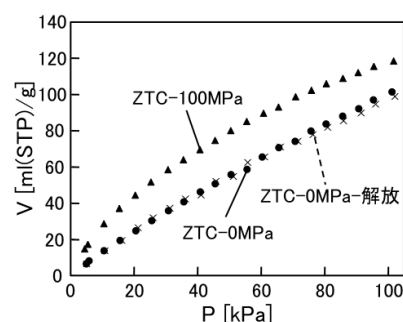


図 III.2.4-(36) 273 K における CO₂ 吸着等温線 (●加圧前、▲加圧状態、×加圧後解放)

研究開発項目 4-6-2. エッジの構造および量とヘテロ原子ドーピングがスピルオーバー貯蔵に及ぼす影響の解明

過去の実験結果より、エッジ構造や窒素原子ドーピングがスピルオーバー貯蔵量に影響する可能性が示唆されているが、より詳細なメカニズムを解明するには、実験の精度をより高める必要がある。そこで、Pt 担持炭素へのスピルオーバー貯蔵の挙動および貯蔵された水素の放出挙動を明らかにした。

Pt 担持 ZTC は、ZTC にジニトロジアンミン白金錯体を担持し、ヒドロホウ素化ナト

リウムにて液相中で還元することで調製した。Pt 担持量は 2.3 wt% である。図 III.2.4-(37) に Pt 担持 ZTC (Pt/ZTC) の透過型電子顕微鏡 (TEM) 写真を示す。粒径 1~3 nm の Pt 粒子が担持されていることがわかる。図 III.2.4-(38) に ZTC および Pt/ZTC の H₂ 吸脱着等温線を示す。ZTC の H₂ 吸着量は圧力に対してほぼ比例しており、脱着等温線は吸着等温線に一致している。すなわち、吸脱着は完全にリバーシブルである。Pt/ZTC (1 回目) においては、圧力 0 kPa 付近で Pt 表面への H 化学吸着による吸蔵量増加が見られ、その後は圧力に対して吸蔵量が直線的に増加する。しかし、その傾きは未担持の ZTC よりも大きい。これは、物理吸着に加えてスピルオーバーした原子状の水素も貯蔵されているためである。Pt/ZTC の脱着等温線は吸着等温線と一致していないが、これは吸蔵された水素が減圧しただけでは完全に放出されないことを示している。1 回目の測定後、室温で 3 h の減圧処理を行い、2 回目の測定を行った。その結果、吸蔵量は 1 回目よりも大幅に低減した。これは、スピルオーバー貯蔵量が減少したためと考えられる。すなわち、スピルオーバーし ZTC に貯蔵された水素は単に減圧しただけでは放出されないことがわかった。また、貯蔵サイトは水素に占有されていると、それ以上の水素を貯蔵しないことがわかった。2 回目の測定後、試料を大気に暴露し、150 °C で 6 h の減圧処理を行い、3 回目の測定を行ったところ、吸蔵量は 1 回目の測定と同じ値まで回復した。すなわち、スピルオーバー貯蔵された水素を放出するには 150 °C 程度の加熱が必要であることがわかった。

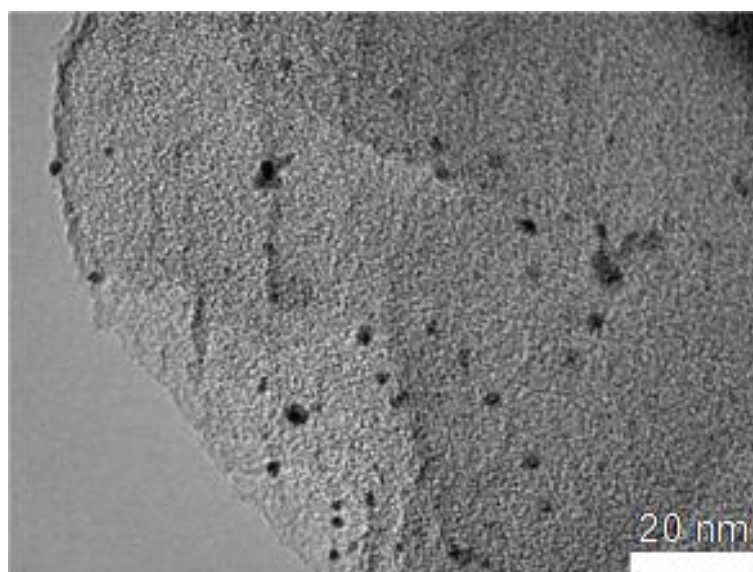


図 III.2.4-(37) Pt/ZTC の TEM 写真

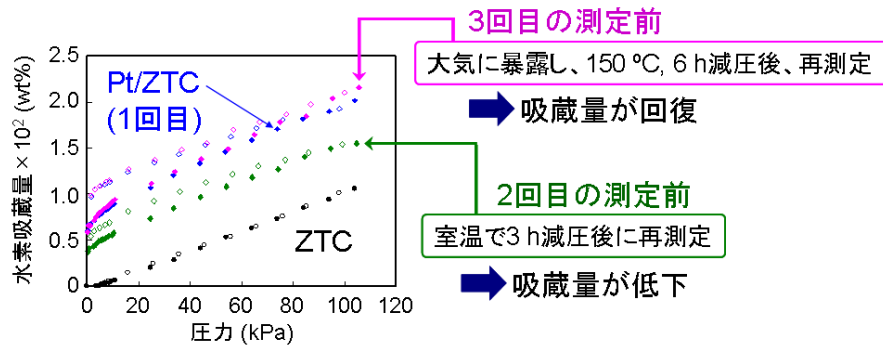


図 III.2.4-(38) ZTC および Pt/ZTC の H₂ 吸脱着等温線 (298 K) ; それぞれ、中塗りのプロット (●) が吸着、白抜きのプロット (○) が脱着を示す。

以上まとめると、低圧領域で占有される貯蔵サイトに関する放出挙動を検討した。低圧領域でのスピルオーバー貯蔵量の測定を繰り返し行う場合、試料を 150 °C で加熱真空脱気すれば、再現性のよいデータが得られることを明らかにした。スピルオーバー水素の貯蔵サイトには様々な種類が存在し、水素を引き付ける力が大きいものから順番に占有されていくものと考えられる。今回検討した低圧領域で占有される貯蔵サイトは比較的水素を引き付ける力が強いが、高圧領域で占有される貯蔵サイトは放出温度条件が 150 °C より低いと予想される。

研究開発項目 4-6-3. 炭素表面と原子状水素との相互作用の解明

スピルオーバーした水素の貯蔵は下記に示す多段階のプロセスによるものである。

- (i) 気相中の水素分子の金属表面への解離吸着
- (ii) 解離吸着した水素原子の金属から炭素表面への移動 (スピルオーバー)
- (iii) 炭素表面における原子状水素の表面拡散
- (iv) 原子状水素の吸着サイトへの吸着

このため、どの段階のプロセスが吸蔵量に影響するのか判断することが困難である。そこで金属を介さず炭素単体へ直接 H ラジカルをドーブし、その放出挙動を昇温脱離測定 (H₂, H₂O, CO, CO₂ のガス放出パターンを測定) によって分析しようと試みた。5 min の H ラジカルドーブ処理前後の昇温脱離パターンを図 III.2.4-(39) に示す。H ラジカルドーブ前の ZTC (図 a) は 750 °C 付近に含酸素官能基の分解による CO 放出ピーク、1000 °C 付近にエッジの H からの H₂ 放出ピークを示す。TPD パターンから計算される ZTC の酸素と水素の含有量はそれぞれ 9.1 wt%、2.8 wt% である。一方、H ラジカルドーブを行った ZTC (図 b) では CO 放出温度が高温側にシフトしており、また H₂ 放出量が大幅に減少している。さらに、低温領域に大きな H₂O 放出ピークが現れている。この大量の H₂O は物理吸着水であり、ラジカル処理により ZTC が極めて親水化されたことを示している。H ラジカル処理によりカーボンが親水化することは考えにくいから、これはチャンバー内に微量存在していた H₂O により OH ラジカルが発生し、この OH ラジカルにより大量の含酸素官能基が ZTC のエッジにドーブされたものと推察される。今回の実験では H ラジカルより OH ラジカルの発生量が多くなり、ZTC が激しく酸化されたものと考えられるが、

僅か5 min の処理にもかかわらず大量のエッジが効率よく酸化されていた点は注目に値する。今後、OH ラジカルの発生量を低減させH ラジカルによる処理を行うことで、大量のHをZTCにドーピングできる可能性があると言える。

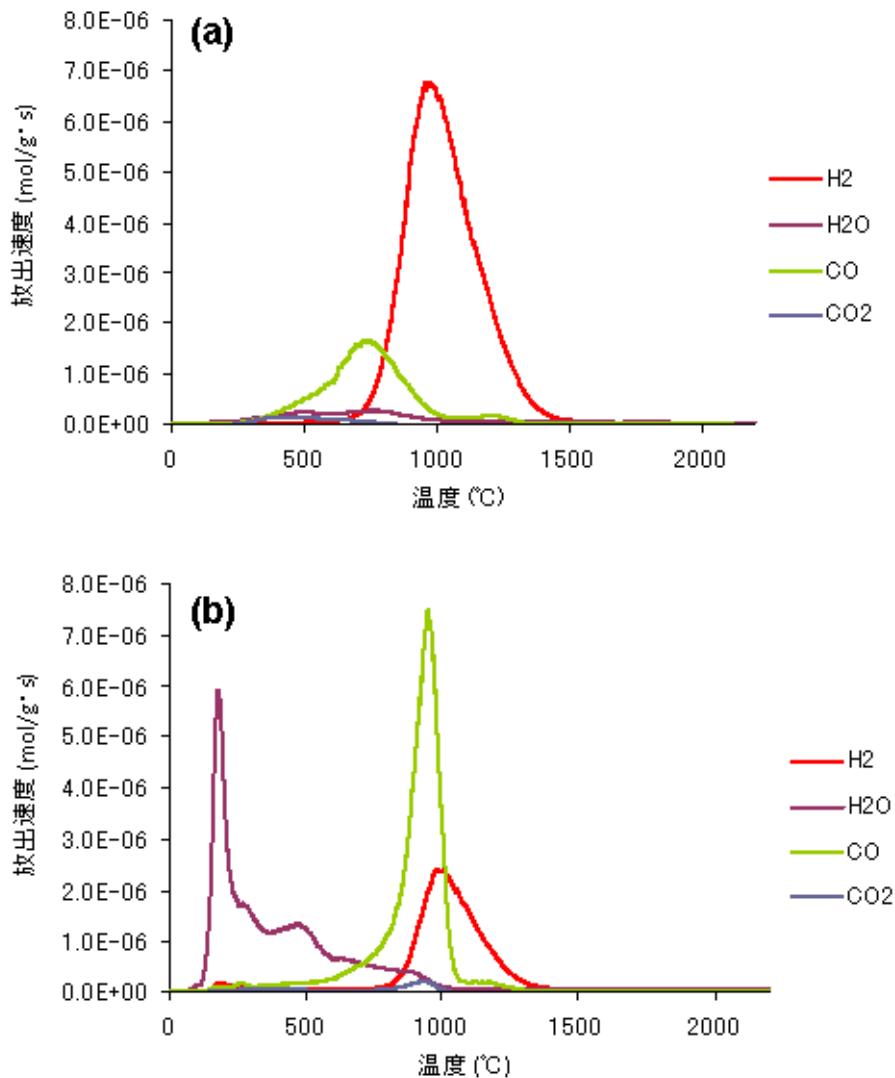


図 III.2.4-(39) (a) ZTC および(b)H ラジカルドーピングした ZTC の昇温脱離パターン

研究開発項目 4-6-4. 金属とその周囲の構造がスピルオーバー貯蔵に及ぼす影響の解明

図 III.2.4-(37) に示した材料のように、粒径 1~5 nm 程度の Pt ナノ粒子をポーラスカーボンに担持し、これを水素のスピルオーバー貯蔵に利用する検討は国内外でこれまでに多く行われてきた。実験の再現性に問題があるものの、一般に粒径が小さくなるほど Pt の比表面積が増加するためスピルオーバーの活性は高くなる傾向にある。しかし、1 nm 以下の超微粒子のスピルオーバー活性についてはこれまで全く不明であった。そこで、従来は困難であった 1 nm 以下の Pt 超微粒子を ZTC に担持し、その水素吸蔵特性の検討を行った。

まず図 III.2.4-(40) に示すスキームにより、有機 Pt 錯体 ((1,5-シクロオクタジエン)

ジメチル白金(II) を ZTC に高分散に担持した。アセトニトリル還流中にシクロオクタジエンはアセトニトリルと入れ替わるので、ZTC に担持されるのはジメチル白金にアセトニトリル 2 分子が配位した状態の Pt 錯体となる (図 III.2.4-(40))。このようにして得られた試料を ZTC-PtComp とする。次に、ZTC-PtComp を水素雰囲気中 25 °C, 50 °C, 70 °C と段階的に熱処理することで Pt 錯体を還元し、超微粒子を生成させた。このようにして調製した Pt 超微粒子担持 ZTC を ZTC-PtSNP とする。

図 III.2.4-(41) に ZTC-PtComp(図 a)と ZTC-PtSNP(図 b)の透過型電子顕微鏡(TEM)写真を示す。図 a においては、Pt 粒子と思われるような粒子は全く観察されない。これは Pt が錯体として担持されているためである。一方、図 b においては 1 nm 以下の微小な粒子が無数に観察された。図 III.2.4-(37) に示した従来の方法で調製した Pt/ZTC と比較すると、明らかに粒径が小さいことがわかる。このように粒径が極めて小さい Pt 超微粒子がポラスカーボンに大量にかつ高分散に担持された例は過去には類を見ない。

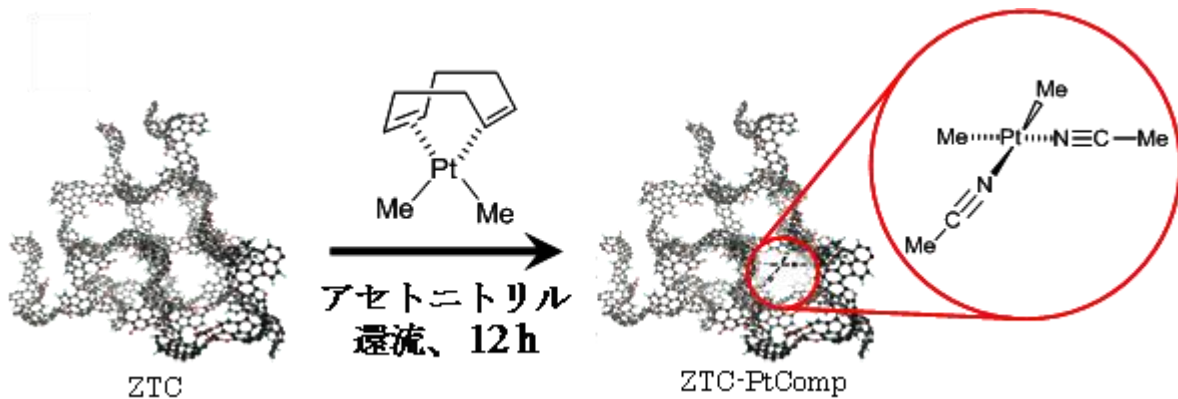


図 III.2.4-(40) ZTC への(1,5-シクロオクタジエン)ジメチル白金(II)錯体導入のスキーム

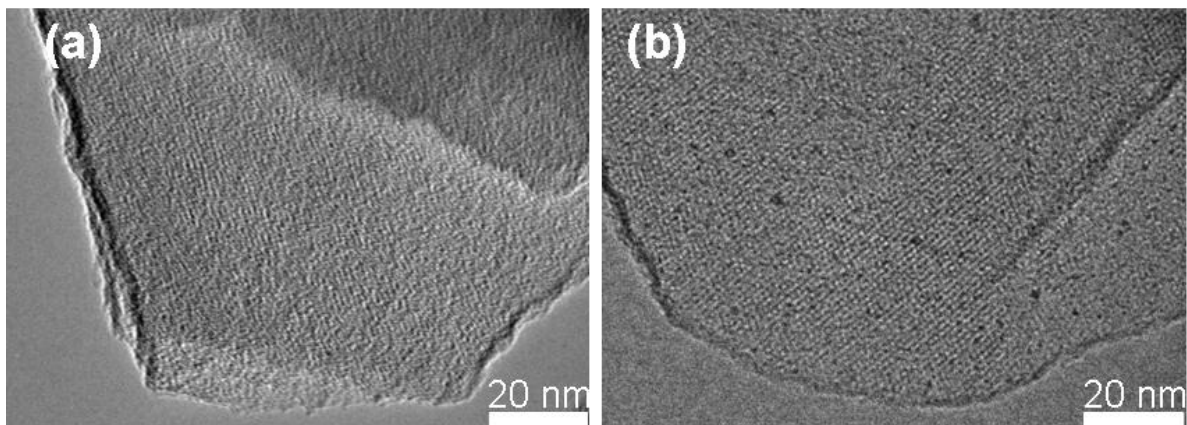


図 III.2.4-(44) (a) ZTC-PtComp と(b) ZTC-PtSNP の TEM 写真

ZTC, Pt/ZTC, ZTC-PtComp, ZTC-PtSNP の水素吸脱着等温線を図 III.2.4-(42) に示す。興味深いのは、Pt 錯体を担持しただけの ZTC-PtComp が 25 °C で大きな吸蔵量を示していることである (青色のプロット)。水素圧力が 10 kPa 以下の低圧領域で約 0.045 wt% の化学吸着量を示している。また、10 kPa 以上の圧力領域での吸着等温線の傾きが ZTC

より大幅に増加している。ZTC-PtComp の比表面積は $2770 \text{ m}^2/\text{g}$ であり、ZTC の比表面積 ($3690 \text{ m}^2/\text{g}$) より大幅に小さい。このため、ZTC-PtComp の水素物理吸着量は ZTC より小さいはずである。しかし、 10 kPa 以上の領域で吸着等温線の傾きが ZTC より大きいことから、ZTC-PtComp においてスピルオーバーによる水素貯蔵が生じていることがわかる。しかも、その傾きは図 III.2.4-(37) に示した Pt/ZTC より大幅に大きい。このように、Pt 金属ナノ粒子ではなく、Pt 錯体そのものにもスピルオーバー貯蔵の能力があることが初めて明らかになった。研究開発項目 4-6-2 で述べたように、Pt ナノ粒子担持炭素では測定の実現性がしばしば問題になる。しかし、Pt 錯体は空気中でも安定であり Pt ナノ粒子より再現性が得やすいため、今後の検討が飛躍的に進むと期待できる。

ZTC-PtComp を水素雰囲気中で還元して調製した ZTC-PtSNP は、還元前より大きな水素の化学吸着量及びスピルオーバー貯蔵量を示した (図 III.2.4-(42), 赤色のプロット)。粒径が $1\sim 3 \text{ nm}$ の Pt ナノ粒子を担持した Pt/ZTC に比べ、粒径が 1 nm 以下の Pt 超微粒子を担持した ZTC-PtComp の方が 10 kPa 以上での吸着等温線の傾きが大きく、スピルオーバー貯蔵量が極めて大きいことがわかる。しかも、測定温度を $50 \text{ }^\circ\text{C}$ に増加させると吸着量はさらに増加した。Pt 超微粒子は空気に暴露すると発熱し燃焼してしまうため取り扱いに難があるが、極めて高いスピルオーバー貯蔵能を示すことが明らかとなった。しかも、脱着等温線の低圧力領域では水素が放出されていることがわかる。ZTC-PtSNP を各温度で繰り返し等温線測定を行ったところ、2 回目の等温線は 1 回目の等温線と全く一致することを確認している。すなわち、ZTC-PtSNP は可逆的に水素の貯蔵-放出を繰り返すことができる。

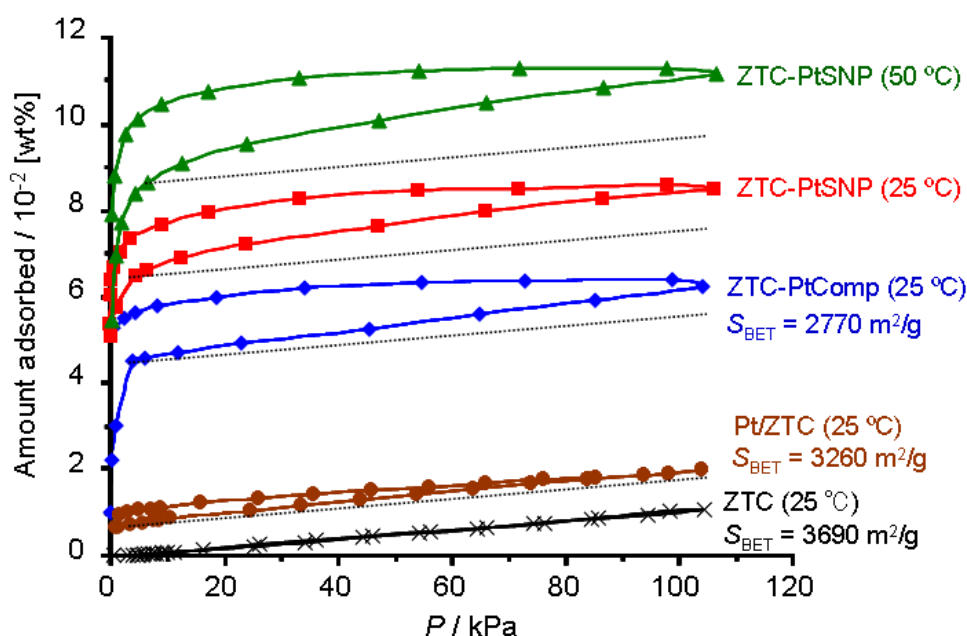


図 III.2.4-(42) ZTC, Pt/ZTC, ZTC-PtComp, ZTC-PtSNP の水素吸脱着等温線。測定温度は $25 \text{ }^\circ\text{C}$ または $50 \text{ }^\circ\text{C}$ で、図中に示してある。Pt 担持試料の各等温線に付帯の黒色の点線は、ZTC の吸着等温線を平行移動したものである。

以上まとめると、金属とその周辺がスピルオーバー貯蔵の及ぼす影響について、下記

に示す多くの新しい知見が得られた。

- ① カーボン担体と疎水性相互作用する有機 Pt 錯体を前駆体とすることで、1 nm 以下のサイズの Pt 超微粒子を高分散に担持できることがわかった。
- ② 1 nm 以下のサイズの Pt 超微粒子は極めて高いスピルオーバー貯蔵能を示す。しかも、貯蔵された水素は減圧するだけで可逆的に放出される。
- ③ 有機 Pt 錯体そのものもスピルオーバー貯蔵能を示すことがわかった。しかもその能力は従来材料（粒径 1~3 nm の Pt ナノ粒子）に比べて大幅に大きい。また、貯蔵は可逆的であり減圧するだけで水素放出が可能である。

特に、③の成果は大変意義深い。有機 Pt 錯体は空気中でも安定であり実験の再現性を大幅に向上させるため、今後の検討も飛躍的に進展することが期待できる。また、配位子を変えることで Pt の電子状態を変化させ、スピルオーバー貯蔵能を制御することも原理的には可能であるし、金属種を Pt 以外の安価なもの（Fe, Ni, Co など）にできる可能性もある。有機 Pt 錯体に関しては、さらに高圧領域での吸蔵-放出特性を検討した。結果は次節に述べる。

研究開発項目 4-6-5. 100 atm 以上の高圧水素下での水素吸蔵能の測定

Pt 錯体担持 ZTC の調製法は、図 III.2.4-(40) に示すスキームをベースにし、より Pt 錯体を安定化させるための工夫を行った。まず、ZTC に水溶性アゾ重合開始剤である VA044 を接触させ、ZTC のエッジとアミジンを反応させた。次にクロロトリフェニルホスフィンのアミジンに配位させ、さらに(1,5-シクロオクタジエン)ジメチル白金(II)錯体を導入して目的の試料を得た。本試料は ZTC-PPtComp と表す。

図 III.2.4-(43) に ZTC, Pt/ZTC, ZTC-PPtComp の 25 °C における 10 MPa までの水素吸着等温線を示す。今回の調製法ではアンカーの量が多かったため、ZTC-PPtComp の比表面積は 1550 m²/g と ZTC の約半分まで低下してしまった。したがって、物理吸着量も ZTC の半分になるはずであるが、実際の吸蔵量はその予想値を大きく上回っている。一方、Pt/ZTC は ZTC より比表面積が低いため物理吸着量は小さいが、スピルオーバー貯蔵量があるため全吸蔵量は ZTC とほぼ同じになっている。

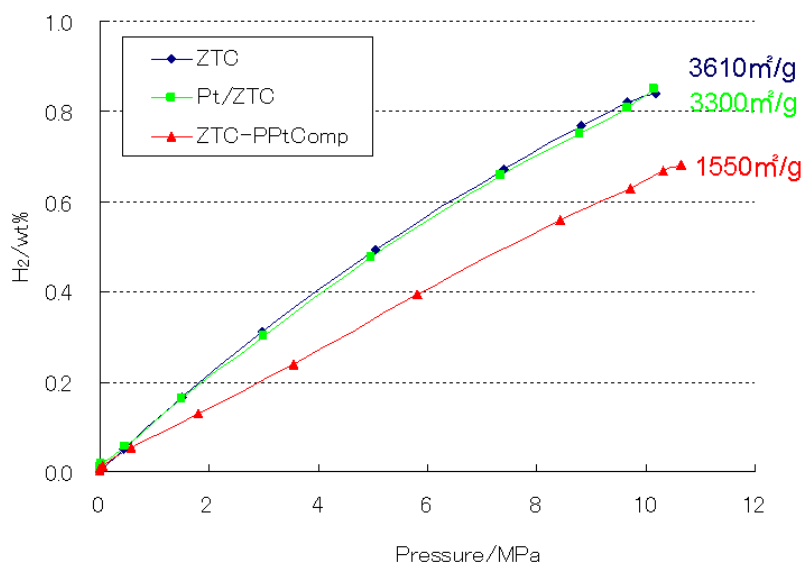


図 III.2.4-(43) ZTC, Pt/ZTC, ZTC-PPtComp の 25 °C における 10 MPa までの水素吸着等温線

Pt/ZTC と ZTC-PPtComp の水素吸着等温線に関し、物理吸着量とスピルオーバー貯蔵量の内訳を図 III.2.4-(44), (45) にそれぞれ示す。物理吸着量は比表面積から推算し、全吸着量から物理吸着量を差し引いた分をスピルオーバー貯蔵量として求めた。図 III.2.4-(37) に示した粒径 1~3 nm の Pt ナノ粒子が分散した Pt/ZTC では、スピルオーバーによる貯蔵量は全体の約 10% である (図 III.2.4-(44))。一方、Pt 錯体を担持した ZTC-PPtComp (図 III.2.4-(45)) では、スピルオーバー貯蔵量の割合が 46% に達している。低圧領域で予想されたように、10 MPa までの高圧領域においても、Pt 錯体そのものがスピルオーバーにより水素貯蔵量をエンハンスでき、しかもその効果は粒径 1~3 nm の Pt ナノ粒子よりも大幅に高いことが明らかとなった。

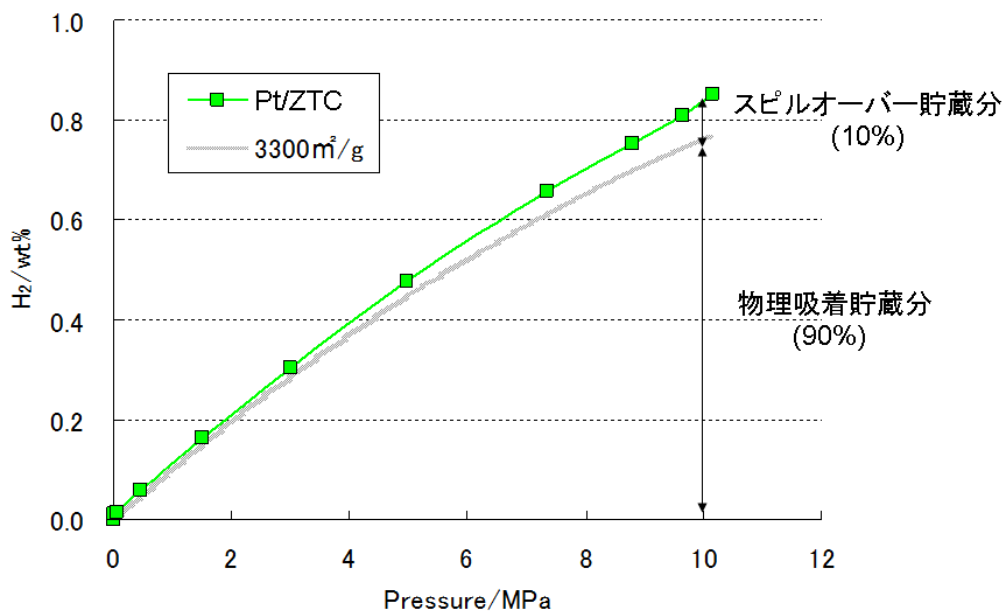


図 III.2.4-(44) Pt/ZTC の 25 °C における 10 MPa までの水素吸着等温線の、物理吸着量とスピルオーバー貯蔵量の内訳

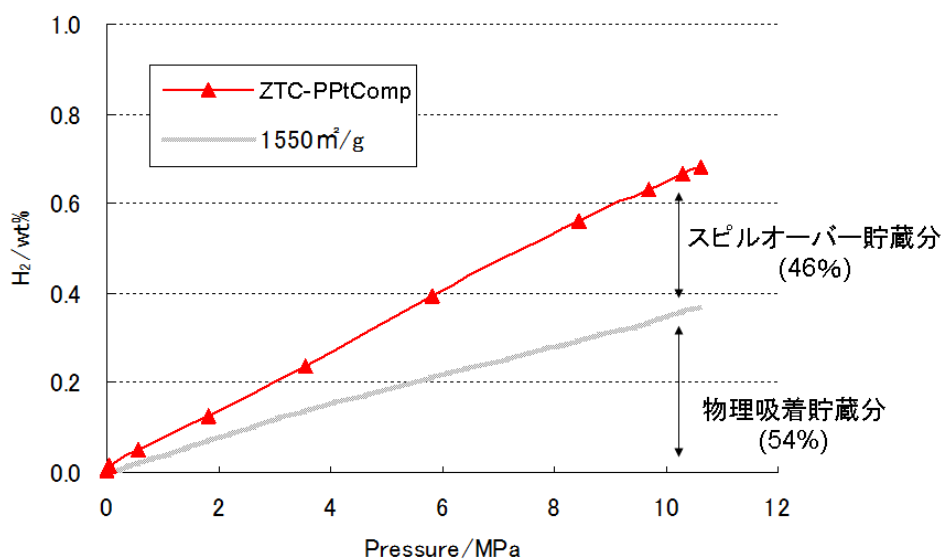


図 III.2.4-(45) ZTC-PPtComp の 25 °C における 10 MPa までの水素吸着等温線の、物理吸着量とスピルオーバー貯蔵量の内訳

図 III.2.4-(46) に、Pt/ZTC および Pt-PPtComp の水素放出挙動のデータを示す。25 °C、10 MPa まで吸蔵させた後、単に圧力を下げただけで、ほぼ全ての水素が放出されていることがわかる。図 III.2.4-(43) に示した低圧領域のデータでは、Pt 担持 ZTC では Pt が錯体であっても金属であっても脱着等温線は吸着等温線に一致しないヒステリシスが観察されたが、高压領域ではその効果はほぼ無視小であることが明らかとなった。スピルオーバーによる水素貯蔵は物理吸着と同じく加熱不要で放出が可能のため、スピルオーバー+物理吸着の原理により水素吸蔵する材料は、現行の高压水素ポンベに充填する材料として適していると言える。

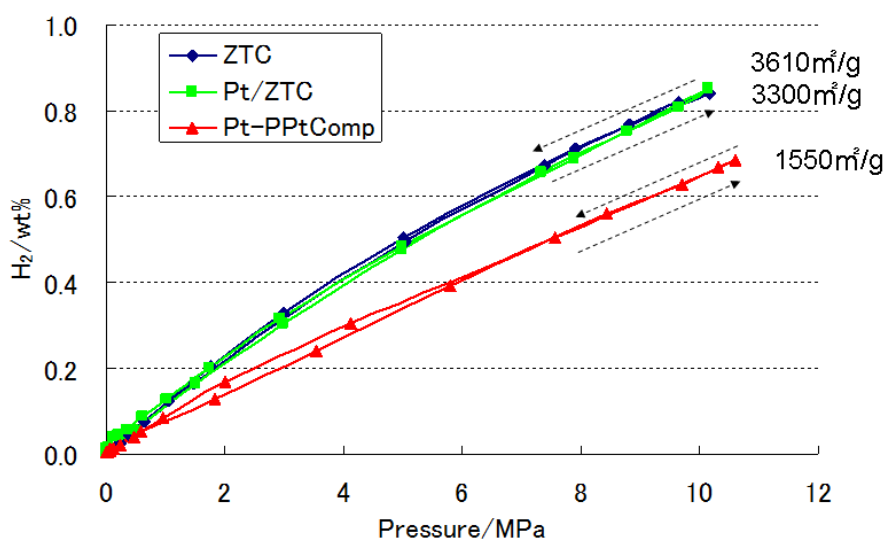


図 III.2.4-(46) ZTC, Pt/ZTC, ZTC-PPtComp の 25 °C における 10 MPa までの水素吸着等温線と、脱着等温線（放出挙動）

2.4.7 非金属系水素貯蔵物質の電子状態と構造安定性

大阪大学産業科学研究所

・研究の目的と概要

本研究では、第一原理手法により水素貯蔵物質の電子状態や構造安定性を解明し、物質設計の指針を提示することを目的とする。

平成 22 年度は、アンモニアボラン NH_3BH_3 及びアルカリ及びアルカリ土類アミドボラン $\text{M}(\text{NH}_2\text{BH}_3)_n$ ($\text{M}=\text{Li}, \text{Na}, \text{K}, n=1; \text{M}=\text{Ca}, \text{Mg}, n=2$) について、その電子状態を第一原理手法に基づき解析した。電子状態・分子結合状態の理解に際しては、第一原理電子状態計算の結果を基に分子軌道論的なアプローチを用い系統的な解釈を試みた。

平成 23 年度は、アンモニアボラン及びアミドボラン系の結晶としての結合形態について、二水素結合と分散力（ファンデアワールス相互作用）に注目することにより解析し、アミドボラン系結晶の反応生成熱を評価した。

・アンモニアボラン NH_3BH_3 の電子状態

水素貯蔵物質の候補であるアンモニアボラン NH_3BH_3 は、室温では固体で、空気中および水中で安定しており、19.6wt%の水素を含んでいる。もし、大部分の水素が放出可能であれば、アンモニアボランの質量密度は、報告されている他の殆どの物質系よりも高いことを示している。第一原理計算の結果、 NH_3BH_3 の電子状態は、孤立した BH_3 分子および NH_3 分子での分子軌道から出発して理解することが可能で、N-B 間の結合は、 NH_3 の HOMO $2a_1$ 分子軌道と BH_3 の LUMO $2a_1$ 分子軌道による σ 結合に起因することが明らかにされた。図 III.2.4-(47) の C_{3v} 構造分子の軌道準位に関する Walsh ダイアグラムに示すように、 $2a_1$ 分子軌道が、 BH_3 では最低非占有分子軌道 LUMO を、 NH_3 では最高占有分子軌道 HOMO を構成している。この $2a_1$ 分子軌道の最大の特徴は、傘状となった C_{3v} 分子構造の B や N から見て H の反対側に大きな耳たぶ状の分子軌道となっていることであり、この HOMO-LUMO が強い σ 結合を構成して安定な NH_3BH_3 分子をつくり上げていることである。 NH_3BH_3 結晶では、この NH_3BH_3 分子が BN の向きを揃えるように積み上げられた構造をつくっている。従って、基本的には中性 NH_3BH_3 分子がつくる電気双極子的な分子間力が存在すると期待され、結晶での電子状態は分子軌道に分子間の小さな飛び移り積分が加わったものとなる。図 III.2.4-(48) に、実験で観測された結晶構造（空間群 $\text{Pmn}21$ ）に対して計算された NH_3BH_3 結晶の状態密度を示す。実際、 NH_3BH_3 結晶の電子状態は基本的に NH_3BH_3 分子の分子軌道とのよい対応が見られる。 NH_3BH_3 結晶での価電子帯の頂きのバンドは主として NH_3BH_3 分子の HOMO であり、元々の BH_3 分子での HOMO が支配的な状態となっている。先に述べた NH_3BH_3 分子の結合を担っている分子軌道は価電子帯の上から 2 番目のバンドを構成している。

・アルカリ及びアルカリ土類アミドボラン $\text{M}(\text{NH}_2\text{BH}_3)_n$ の電子状態

NH_3BH_3 はその水素脱離反応において、BN の強い結合に起因してアンモニア NH_3 やジボラン B_2H_6 への分離を起こすことなく多くの水素量を放出することが知られている。しかしながら、その反応は非可逆であること、及び脱離反応において毒性の強いボラ

ジン(BH-NH)₃ を発生する問題点が指摘されている。この問題を解決するため、最近、NH₃BH₃ の水素をアルカリ元素もしくはアルカリ土類元素で置き換えたアルカリ及びアルカリ土類アミドボラン M(NH₂BH₃)_n が注目を集めている。アルカリ及びアルカリ土類アミドボラン M(NH₂BH₃)_n (M=Li, Na, K, n=1; M=Ca, Mg, n=2) 結晶の電子状態は、基本的に M⁺ と (NH₂BH₃)⁻ のイオン結合から構成されている。従って、その価電子帯は主として (NH₂BH₃)⁻ の分子軌道からつくられている。図 III.2.4-(49) の分子軌道準位ダイアグラムに示すように、BH₃ 分子の LUMO と (NH₂)⁻ 分子の 2a₁ 分子軌道が (NH₂BH₃)⁻ 分子での σ 結合を、BH₃ 分子の HOMO と (NH₂)⁻ 分子の 2b₂ 分子軌道が (NH₂BH₃)⁻ 分子での π 結合を構成していることが明らかにされた。M(NH₂BH₃)_n 結晶の電子状態は、NH₃BH₃ 結晶と同様に、基本的に分子軌道からの理解が可能である。しかしながら、結晶の体積は M⁺ のイオン半径に従って変化し、これにより分子間の飛び移り積分が決定されているため状態密度ピーク構造の幅は M⁺ イオン半径に依存して変わることが明らかにされた。また、アルカリ元素に比べてアルカリ土類元素の場合に、M イオンの軌道がより大きく価電子帯に混成している。これはアミド系水素化合物に対してこれまでに理解されていることと類似の状況である。従って、アルカリ土類アミドボランでは相対的に (NH₂BH₃)⁻ 分子内の結合が弱まっている可能性がある。M=Ca の場合に Ca-d 軌道の混成が顕著であり特徴的である。

・アンモニアボラン結晶の結合形態：二水素結合と分散力

アンモニアボラン NH₃BH₃ 結晶は二水素結合を示す典型物質としてよく知られている。図 III.2.4-(48) に示したように、N に共有結合した H と、B に共有結合した H は異なる局所電子状態を示し、結果的に符号の異なる電荷をもつことで結晶では N-H^{δ+}...^{δ-}H-B の様な強い分子間力に導いている。これまでに報告された第一原理計算及び我々の計算から、GGA-PBE の近似の範囲で決定された分子内の結合距離と二水素結合距離は中性子回折の実験結果を正しく再現し、重要な二水素結合の効果は GGA-PBE 計算でよく表現されていることが分かる。しかしながら、計算された平衡格子定数、平衡体積及び体積弾性率は中性子回折等の結果をまったく再現できていない(表 III.2.4-(3))。分子内構造はよく再現しているものの、分子間結合に関わる、平衡体積を過大評価、体積弾性率を過小評価していることは、分子間結合に重要な要素が欠落していることを示唆しており、分子性結晶にしばしば見られる分散力(ファンデアワールス相互作用)であると予想される。分散力を第一原理計算で考慮する手法は、Dion らによる非経験的手法と Grimme らによる経験的手法が知られている。ここでは、分散力の結合における効果を調べるため簡敏な後者の手法を用いた。その結果を表 III.2.4-(3) に示す。分散力を含めた計算結果は平衡格子定数、平衡体積、体積弾性率を定量的にも実験を再現し、分散力の重要性を示している。当然なことではあるが、分散力の効果による分子内構造の変化は無視できるくらい小さい。また、二水素結合に関わる水素原子上の電荷の定量的評価に関して、以前の第一原理計算では Mulliken 電荷による解析法により計算されているが期待される電荷を必ずしも与えて居らず、今回、Berry 位相の方法により計算された Born の有効電荷が二水素結合における電荷に対して有効な指標を与えることが明らか

かとなった。

・アミドボラン系結晶の結合形態と反応生成熱

$M(\text{NH}_2\text{BH}_3)_n$ 結晶の電子状態は図 III.2.4-(49) に示すようにその価電子帯は $(\text{NH}_2\text{BH}_3)^-$ の分子軌道から構成されており、 M^{n+} イオンとのイオン結合が主たる結合形態であると予想される。実際、 $M(\text{NH}_2\text{BH}_3)_n$ 結晶の格子定数、平衡体積は分散力の効果を含まない GGA-PBE の範囲でよく再現され、分散力は無視できることが第一原理計算から明らかとなった。また、 $M(\text{NH}_2\text{BH}_3)_n$ 結晶におけるイオン周りの配位構造は M^{n+} のイオン半径で整理ができ、配位数はイオン半径に従って多くなるイオン結晶に特有の傾向を示しており、電子状態から期待されるイオン性とコンシステントである。 NH_3BH_3 で二水素結合に関与した H のうち B と結合したものは H^δ 状態をほぼ維持し、同じく陰イオニックな N イオンとともに M^{n+} イオンに配位している局所構造はたいへん興味深い (図 III.2.4-(50))。

アンモニアボラン NH_3BH_3 からアミドボラン系 $M(\text{NH}_2\text{BH}_3)_n$ ($M=\text{Li}, \text{Na}, n=1$; $M=\text{Ca}, \text{Mg}, n=2$) が生成される反応熱を第一原理計算から評価した。反応式は $n\text{NH}_3\text{BH}_3 + M\text{H}_n \rightarrow M(\text{NH}_2\text{BH}_3)_n + n\text{H}_2$ である。結果は、 $M=\text{Li}$ に対して $6\text{kJ}/\text{H}_2 \text{ mol}$ 、 $M=\text{Na}$ に対して $21\text{kJ}/\text{H}_2 \text{ mol}$ 、 $M=\text{Ca}$ に対して $14\text{kJ}/\text{H}_2 \text{ mol}$ 、 $M=\text{Mg}$ に対して $17\text{kJ}/\text{H}_2 \text{ mol}$ を得、いずれの反応も発熱反応である。 $M=\text{Mg}$ に関してはこの反応は実験的に知られておらず、別の安定相の存在が示唆される。

・まとめ

結晶における結合形態に関してまとめると、アンモニアボラン NH_3BH_3 は、アンモニアボラン分子の共有結合的な分子軌道としての電子状態を色濃く残し、分子間結合としては二水素結合と分散力が重要な役割をもっている。一方、アミドボラン $M(\text{NH}_2\text{BH}_3)_n$ 系では、価電子状態については $(\text{NH}_2\text{BH}_3)^-$ の分子軌道でよく記述される電子状態をもちアンモニアボランとの類似性を有している一方で、結合については $(\text{NH}_2\text{BH}_3)^-$ と M^{n+} イオン間のイオン結合が支配的であり分子性結晶のアンモニアボランとは異なる結合形態を有している。この意味で、アミドボラン系はアミド系やアラネート系と類似な電子状態、結合形態を有する物質群と見ることができ、アルカリ元素やアルカリ土類元素の軌道が価電子帯に混成する傾向をみてもその類似性が確認される。物質設計指針に関して、分子性結晶の結合形態を有する物質からスタートして、水素原子の一部をアルカリ元素やアルカリ土類元素で置換した系は、水素貯蔵物質として既に注目を集めているアミド系やアラネート系と類似の電子状態・結合形態が期待され、物質探索の有力な候補となるものと期待される。

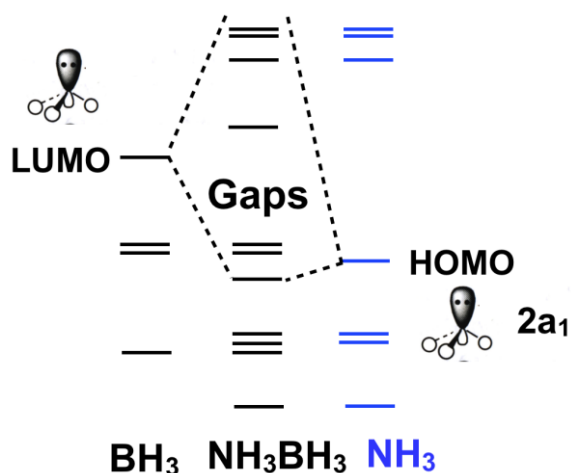


図 III.2.4-(48) 実験で観測された結晶構造（空間群 $Pmn21$ ）に対して計算された NH_3BH_3 結晶の全状態密度と各軌道角運動量成分に射影した部分状態密度。エネルギーの原点は価電子帯の頂きを取られている。黒実線は全状態密度、赤実線は s 軌道成分、青実線は p 軌道成分を表す。

図 III.2.4-(47) C_{3v} 構造分子 BH_3 及び NH_3 の分子軌道準位に関する Walsh ダイアグラムと NH_3BH_3 分子の分子軌道準位。 NH_3BH_3 分子の結合は主として BH_3 分子の LUMO と NH_3 分子の HOMO からなる σ 結合で構成され、両分子軌道はともに大きな耳たぶ形状を有する $2a_1$ 分子軌道である。

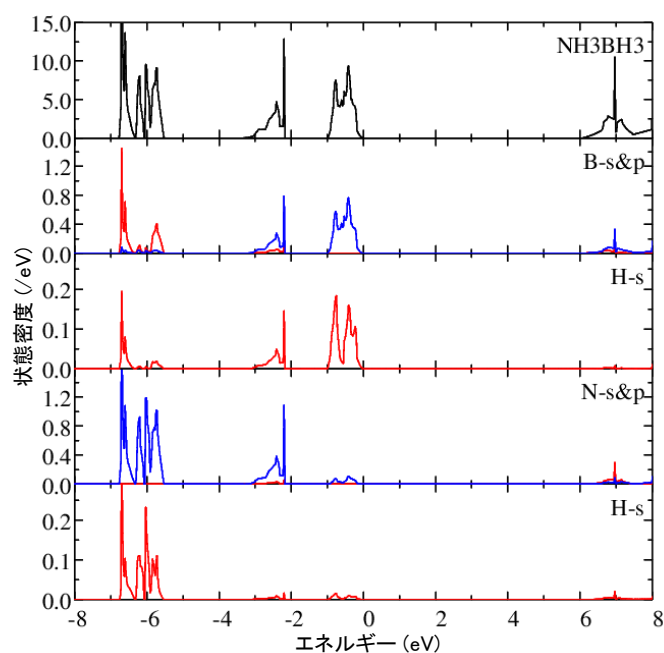


図 III.2.4-(49) BH_3 、 $(\text{NH}_2)^-$ 、 $(\text{NH}_2\text{BH}_3)^-$ の分子軌道準位ダイアグラム。 BH_3 分子の LUMO と $(\text{NH}_2)^-$ 分子の $2a_1$ 分子軌道が $(\text{NH}_2\text{BH}_3)^-$ 分子での σ 結合（黒点線）を、 BH_3 分子の HOMO と $(\text{NH}_2)^-$ 分子の $2b_2$ 分子軌道が $(\text{NH}_2\text{BH}_3)^-$ 分子での π 結合（赤点線）を構成している。

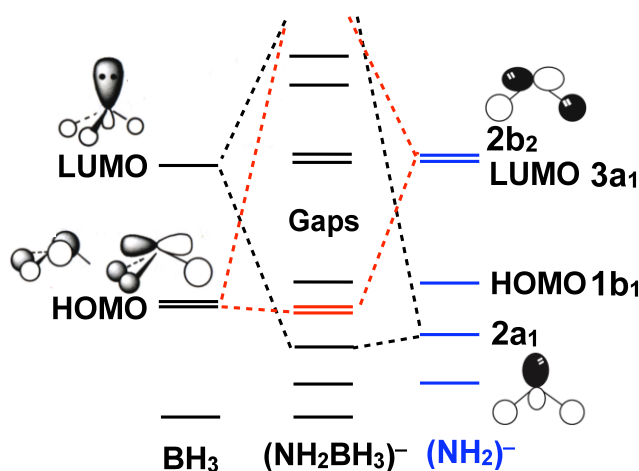


表 III.2.4-(3) アンモニアボラン NH_3BH_3 の平衡格子定数 a , b , c 、平衡体積 V 、体積弾性率 B_0 。GGA-PBE は交換相関汎関数として現在標準的な GGA-PBE を用いた第一原理計算の結果、GGA-PBE-D* は GGA-PBE に Grimme により提唱されている経験的分散力を含めた計算結果。実験の格子定数、平衡体積は Hess らによる中性子回折[J. Phys. Chem. 113, 5723, (2009)] に、体積弾性率は Flinchuk ら [Phys. Rev. B 79, 214111(2009)] による。

	a (Å)	b (Å)	c (Å)	V (Å ³)	B_0 (GPa)
GGA-PBE	5.197	4.961	5.572	143.68	5.1
GGA-PBE-D*	5.308	4.665	4.994	123.70	11.7
実験	5.546	4.619	4.992	127.86	9.9

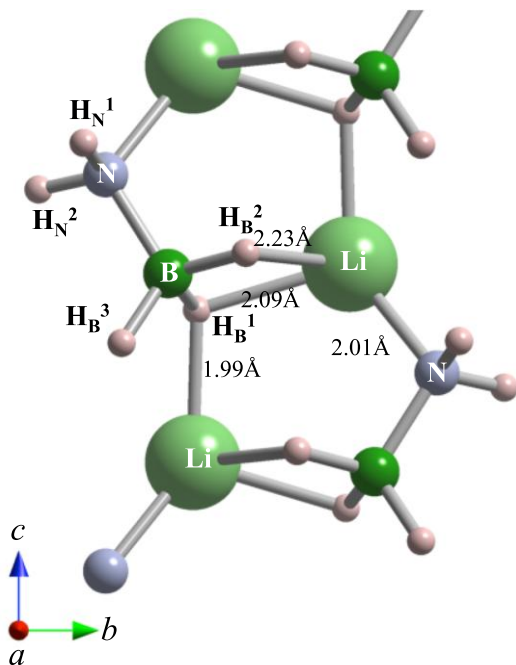


図 III.2.4-(50) LiNH_2BH_3 における Li イオン周りの局所構造。Li イオンは、いずれも負電荷を帯びた H (H_B) 及び N イオンに配位している。

項目	目的と実施内容	成果	達成度
4-1	<p>目的：カーボン系および金属系材料の水素貯蔵特性の評価技術を確立する。</p> <p>実施内容：ZTC, LaNi_5, NaAlH_4 の水素吸蔵サイト・エネルギー・拡散経路等を第一原理計算により解析・評価する。</p>	<p>ZTC 中の水素の吸着特性の評価技術を確立し、スピルオーバー水素貯蔵が可能であることを理論的に示し、貯蔵特性向上への指針を得た。また LaNi_5, NaAlH_4 中の水素拡散経路の評価技術を確立し、元素添加による吸放出特性向上の理論的根拠を得た。</p>	◎
4-2	<p>目的：金属系材料における貯蔵特性の決定要因を特定し、水素貯蔵メカニズムを解明する。</p> <p>実施内容：格子欠陥を含む系について古典分子動力学計算と第一原理計算を行い、構造的特徴と水素貯蔵特性との関連を解析し、各種構造における水素貯蔵メカニズムを明らかにする。</p>	<p>バナジウムへの元素置換による構造変化と水素貯蔵特性変化を理論的に予測し、実験と整合する結果を得た。また bcc, fcc 金属ナノ粒子の水素化シミュレーションにより、粒径・結晶構造・相互作用・温度等の変化によって異なる水素貯蔵メカニズムが発現することを明らかにした。</p>	◎
4-3	<p>目的：金属系材料の水素化に伴う構造安定性発現のメカニズムを解明する。</p> <p>実施内容：分子動力学法、モンテカルロ法、第一原理、統計熱力学に基づく計算・解析を行う。</p>	<p>第一原理法とフォノン解析に基づいてバナジウム水素化物の構造安定性発現のメカニズムを解明した。また統計熱力学に基づく計算により LaNi_5 の PCT 曲線の再現に成功した。</p>	○
4-4	<p>目的：新規材料に関するシミュレーション研究から、新規水素貯蔵材料を探索する。</p> <p>実施内容：第一原理計算プログラム TOMBO に時間依存密度汎関数理論のコードを追加し、各種水素貯蔵材料に適用し、水素貯蔵能と水素吸着エネルギーを求めた。またドーパントによる水素吸着エネルギーの改善、電荷移動とその起源を詳細に検討する。</p>	<p>大きい重量密度を実現するために、軽い元素 (Li, B, C, N 等) を主成分とする材料系を選び、水素分子の安定吸着位置、吸着エネルギーを求めた。小さい吸着エネルギーの欠点を改善するために、ドーパントの導入、ラジカルなサイトを持つナノ構造の利用の有効性を示した。またその材料と水素分子の系における電荷密度分布を描き、水素貯蔵材料として使用するための設計指針を得た。</p>	◎

項目	目的と実施内容	成果	達成度
4-5	<p>目的：遷移金属水素化物系に対する高圧下での水素の安定性や物性の変化から新規水素貯蔵物質の可能性を探索する。さらにアルカリ金属水素化物・アンモニア系の水素放出反応率向上の指針を得る。</p> <p>実施内容：FeH_x、CoH_x、NiH_xなどの遷移金属水素化物系、およびアルカリ金属(Li,Na,K)水素化物・アンモニア系に対する第一原理計算を行う。</p>	<p>高水素圧下での遷移金属水素化物の相安定性の議論には第一原理計算による固相のエネルギー、エンタルピーの評価と共に水素気体のギブスエネルギーの評価が重要であることを明らかにした。</p> <p>アルカリ金属水素化物・アンモニア系の水素放出のアルカリ金属依存性は Li>Na>K の順にポテンシャルのバリアが低くなり、実験による反応性の違いと同様の傾向が見られた。また、電子状態計算により、アルカリ金属水素化物側の水素の電荷の絶対値が大きいほどエネルギーバリアが低くなることを明らかにした。</p>	○
4-6	<p>目的：ゼオライト鑄型炭素をモデル物質とするスピルオーバー水素貯蔵メカニズムの解明</p> <p>実施内容：実験的手法により ZTC へのスピルオーバー水素貯蔵技術を検討する。</p>	<p>有機 Pt 錯体そのものにもスピルオーバー貯蔵能があることを世界で初めて示した。また、Pt 超微粒子が極めて高いスピルオーバー貯蔵能を示すこともわかった。これらいずれの材料も貯蔵された水素は減圧するだけで可逆的に放出された。</p>	◎
4-7	<p>目的：水素貯蔵物質、特に非金属系の電子状態や構造安定性を解明し物質設計の指針を提示する。</p> <p>実施内容：第一原理手法により上記内容の解析を行う。</p>	<p>アンモニアボラン NH₃BH₃ 及びアルカリ及びアルカリ土類アミドボラン系 M(NH₂BH₃)_n (M=Li, Na, K, n=1; M=Ca, Mg, n=2) の電子状態については第一原理電子状態計算の結果を基に分子軌道論的なアプローチを用い系統的な解釈を試みた。また、結晶としての結合形態について分散力(ファンデアワールス相互作用)を考慮することにより解析し、アンモニアボランの分子結合は二水素結合と分散力が重要である一方、アミドボラン系ではイオン結合が主たる結合形態であることが明らかとなった。</p>	○

【成果の意義】

今回得られた成果のポイントは、各種材料における構造・元素・温度等の変化が水素貯蔵特性に与える影響を計算機シミュレーションによって再現し、貯蔵特性向上への条件を定量的に示したことである。このような計算機支援による特性改善手法の発展は、今後の産業界等での水素貯蔵材料開発において、以下のように大きな意義を持つ。

(1) カーボン系材料

ZTC の白金単原子担持による水素吸蔵量の大幅な増大とスピルオーバー水素原子の吸着エネルギー最適化の条件を示したことにより、今後のカーボン系材料を用いた車載用ハイブリッドタンクの充填材等への応用が期待できる。日本の ZTC 合成技術は世界の最先端にあり、今回示された曲率や窒素置換等の制御により更なる ZTC の特性向上を図るとともに、同じ水素貯蔵メカニズムを持つ他の吸着系材料への応用も進めることで、吸着系水素貯蔵材料研究における日本の優位性を維持・発展させることが期待できる。また今回新たに提案した Li 修飾グラフェンシート及び BN シートについても合成試験等の検証研究と理論計算との比較を早急に行うことで、計算に基づく水素貯蔵特性の予測精度向上と研究開発コストの低下が期待できる。

(2) 非金属系材料

今回明らかになったアルカリ金属元素による違いや Li 添加の効果を基に、反応速度の改善と吸放出温度・圧力の低減を進めることにより、非金属系水素貯蔵材料の実用化と産業応用を加速することができると期待される。一方、クラスレート氷+ヘルプガスによる水素貯蔵では、その貯蔵能を大きく落とすことなく -30°C 程度までの温度特性改善が可能であることを示しており、この予測に基づいて、自然条件の厳しい寒冷地域における新しい水素貯蔵技術等への応用が期待できる。

(3) 金属系材料

金属系材料は高い体積密度で水素を貯蔵できることから、特に定置型の水素貯蔵材料としての期待が高いが、水素吸放出に伴うミクロな構造変化に伴う耐久性低下の克服が課題の一つとなっていた。今回、実験的に把握が難しい、水素吸放出に伴うミクロ構造変化の詳細を推測できたことにより、性能低下をもたらす構造変化を回避し耐久性を向上させる技術の開発へ繋がることを期待される。また一定レベルで成功した、金属ナノ粒子への水素貯蔵シミュレーションや PC 等温線シミュレーションの基となった計算プログラム・計算手法等を産業界へ公開・共有することで、今後の水素貯蔵材料研究の一層の加速が期待できる。

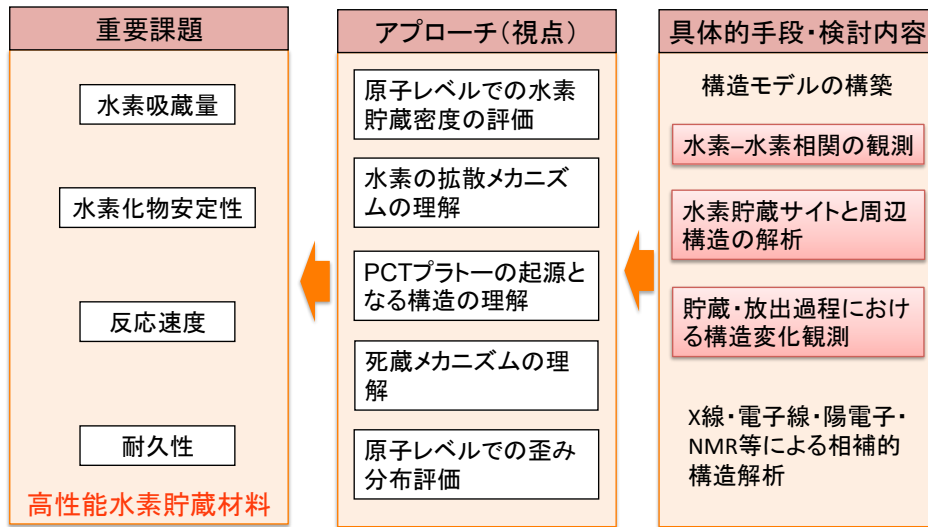
2.5 研究開発項目⑤「中性子実験装置による水素貯蔵材料に関する共通基盤研究」

【研究開発の概要】

水素貯蔵・放出過程における水素の空間配置を精度良く知ることは、材料開発における基盤技術であり、その技術確立の必要性は高い。中性子は水素原子に対する感度が高いため、水素貯蔵材料における水素の配置を結晶構造解析により原子レベルで明らかにでき、とくに金属材料中で水素原子が吸蔵されるサイトの解析に中性子回折は威力を発揮してきた。これまでは、ブラッグ反射と呼ばれる原子配置の規則性に由来する信号を中心に解析が行われてきたが、最近の水素貯蔵材料に多くみられる、結晶として十分な大きさを持たないナノ材料や結晶としての性質に欠ける非晶質の材料、つまりブラッグ反射が弱い、または全く生じない構造の解析も必要となっている。さらに、吸蔵サイト間を頻繁に移動している水素原子同士がどのように影響を及ぼし合っているか（水素原子間相関）ということは、材料中の水素密度や吸蔵・放出速度を左右するものであるが、十分な研究がなされていないのが現状である。中性子全散乱法は、規則構造をもたないアモルファスや液体の研究に利用され、水素貯蔵過程におけるアモルファル化や結晶材料中の死蔵サイトの解析等で成果をあげてきた。中性子全散乱法は、中性子の回折パターンをフーリエ変換することにより得られる実空間の 2 体分布関数（Pair Distribution Function, PDF）から、物質の構造を解析するものである（PDF 解析）。ブラッグ反射に着目した粉末結晶構造解析と PDF 解析を合わせて実施することにより、水素貯蔵材料における水素原子間相関の解明が期待できる。さらに原子核により散乱される中性子と電子により散乱される X 線による回折データと組み合わせた解析を行うことで、原子位置精度を向上するとともに、原子間の結合状態について知見を得ることもできる。電子顕微鏡観察、NMR、陽電子消滅等との相補的利用も極めて効果的である。このようにして得られた実験データと第一原理計算や分子動力学計算の結果とを比較・対応させることで水素原子の拡散メカニズムの解明や新規材料予測等への展開の期待もできる。

本研究開発は、大強度陽子加速器施設（Japan Proton Accelerator Research Complex, J-PARC）の世界最高レベルのパルス中性子源の 21 番ビームライン（BL21）に、高強度中性子全散乱装置（NOVA）を設置し、水素貯蔵材料の基盤技術としての中性子散乱法を確立することを最終目標とした。空間分解能の高い PDF を得るためには、短波長、すなわち高エネルギー（～5 eV）中性子の利用が必要で、高エネルギー中性子を効率よく発生するパルス中性子源は中性子全散乱法に最も適している。NOVA 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、全散乱装置として世界最高水準の装置となる。結晶構造解析と PDF 解析の両方が可能なデータを測定可能なため、結晶、アモルファス、液体と様々な構造を有する水素貯蔵材料のナノスケールでの構造変化の観測が可能である。NOVA では、水素-水素相関の観測、水素貯蔵サイトと周辺構造の解析、及び貯蔵・放出過程における構造変化観測といった構造情報を得て、原子レベルの水素貯蔵密度の評価、拡散メカニズムの理解等の視点により構造を解析することで、高性能水素貯蔵材料の重要課題への指針を提示することができると考えている（図 III.2.5.-(1)）。本研究開発では、世界最高水準での構造情報取得のための基盤技術の確立を目

標とした。



図III.2.5.-(1) 中性子全散乱装置を用いた指針提供に向けた科学的アプローチ

【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。

【本研究開発の構成】

上記目標を達成するために、高エネルギー加速器研究機構が中心となって再委託先の6機関と密接な連携の下、世界最高性能を有する中性子全散乱装置（NOVA）のハードウェア及びソフトウェア開発研究を進め、NOVAの装置性能検証を行いながら、水素貯蔵材料の構造研究を展開する。再委託先は、中性子全散乱法により世界トップレベルの成果を上げてきた研究者であり、NOVAの性能評価を行いながら、世界最高性能実現に向けた検討を進めた。また金属系、非金属系及び物性サブグループと水素貯蔵材料を共有し、多面的な構造解析を展開した。

【成果の概要】

図III.2.5.-(2)は、NOVAの全体構成図（概念図）である。平成19年度に建設に着手し、平成21年5月28日の初中性子回折実験を経て、平成22年度までにハードウェア開発を終了するとともに、ソフトウェア開発を進め、所期の性能をほぼ満たしていることを実証した。粉末結晶試料、非晶質物質及び液体物質の構造解析を行いながら、データ解析ソフトウェアの整備を行った。詳細な解析を行いながら、NOVAの低いノイズレベルで高精度に測定する能力は世界最高水準であることを確認した。具体的には、運動量遷移量が 60 \AA^{-1} までの回折

プロフィールを取得可能であることを確認した。また、数十 mg 程度の試料量でも測定が可能であり、試料の量が 1g 程度あれば数分程度で測定が完了する。構造解析のための装置分解能も所期の性能を満たしている。また、10MPa の水素ガス圧下での実験を始めとする水素貯蔵材料計測用機器の整備と水素位置精密測定のためのフェルミチョッパー整備によりハードウェア整備を終えた。水素貯蔵・放出過程の経時変化観測の実現が期待できる。平成 22 年度後半より、アルミ水素化物の表面構造解析や高圧下でのランタン水素化物の構造解析を始めとする水素貯蔵材料の構造研究を開始した。基盤技術としての中性子散乱法を確立するという目標は達成した。

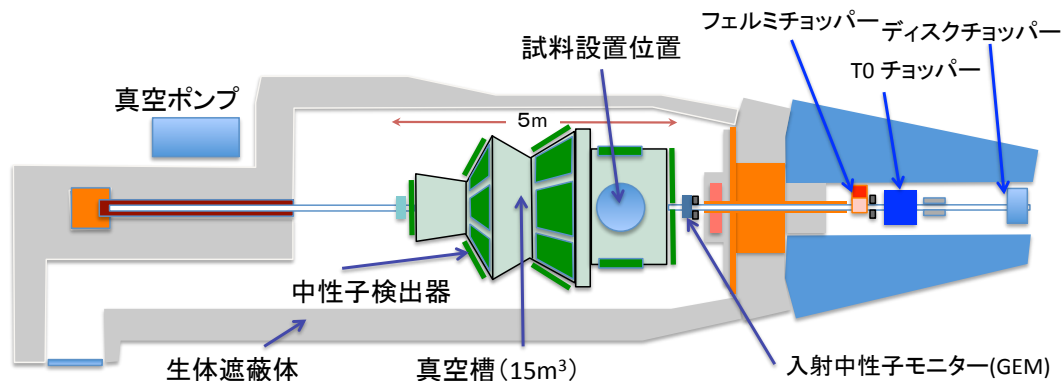


図 III.2.5.-(2) 中性子全散乱装置の全体構成図

【これまでの成果】

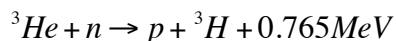
2.5.1 中性子検出器システムの開発・製作

(高エネルギー加速器研究機構)

2.5.1.1 高性能中性子検出器システムの開発

試料により散乱された中性子を観測するための検出器システムを開発し、平成 20 年度から平成 21 年度にかけて製作・設置した。平成 21 年 5 月 28 日より中性子ビーム実験を開始した。

中性子は陽子よりやや重く、電荷は持たない。そのため、中性子は物質とクーロン相互作用を起こさず、主として核力による原子核との相互作用の結果、中性子反応を起こす。中性子検出器は、中性子反応で放出された荷電粒子を検出することで、中性子を検出する。具体的には、中性子吸収断面積の大きな元素に吸収させる。ヘリウムの同位体であるヘリウム-3 (^3He) ガスは、中性子検出のための非常に使いやすい変換元素として広く使用されている。ヘリウム-3 は、中性子を吸収して、陽子 (^1H) とトリチウム (^3H) に分解する。



上記の中性子反応で生成した陽子とトリチウムは、周囲のガス分子を電離し、中性子 1 個あたり約 8000 個の電子-イオン対を生成する。これらの電離電子は中性子検出器内に形成された高電場のために、二次的な電離現象 (ガス増幅) を引き起こす。中性子検出器では、ガス増幅過程で生成した大量の荷電粒子が電極に向かって流動する様子が信号として検出される。ヘリウムガスを使う中性子検出器は、ガンマ線と中性子線の区別が容易であるこ

とや動作が安定していることから、広く使われており、技術的には確立されたものと言える。ただし、ヘリウムガス検出器は、ヘリウムガス圧や検出器形状により動作が変わるため、所期の性能が実現されることの実験的な確認が必要となる。NOVA では、直径 1/2 inch、中性子検出有効長さ 80 cm の円筒形状のヘリウムガス検出器を使用している。ヘリウムガス圧力は、2 MPa である。ヘリウムガス圧力が高い方が中性子を検出する能力が高くなる。検出器の中心に芯線（電極）が配置されており、芯線の両端からの電荷を検出し、電荷の比から検出器内のどの位置で中性子が検出されたのかを求める位置敏感型検出器である。位置分解能は約 5 mm である。原子炉中性子源と NOVA の中性子線を使った動作試験を行った上で、総計約 900 本のヘリウムガス検出器を製作し、図 III.2.5.-(3) に示した面上に配置し、立体的に配置することで検出器バンクを構成している（図 III.2.5.-(4)）。散乱角（ビーム進行方向と試料-検出器を結ぶ直線のなす角度）は、0.8 度から 165 度である。総計約 900 本のヘリウムガス検出器の総面積は、図 III.2.5.-(4) の総有効検出面積の 70% に相当する。ヘリウム-3 ガスが世界的に高騰したため（最大 10 倍程度）、残り 30% を充足することの費用対効果が極めて小さくなったため、検出器の設置は 70% で完了することとした。主に使用する 90 度バンクと背面バンクは 100% 充足しており、NOVA の性能への影響は小さい。

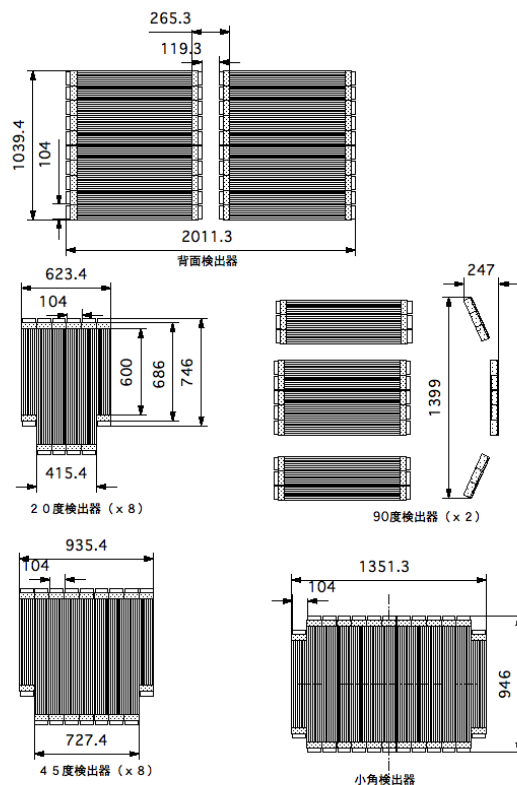
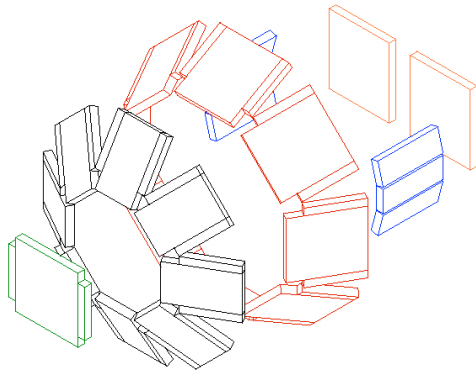
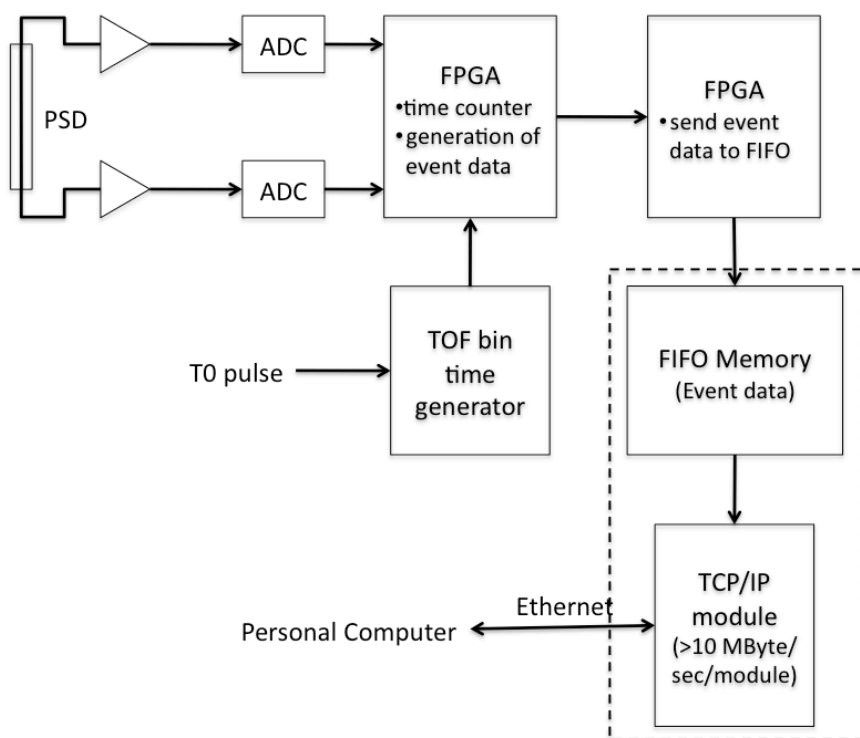


図 III.2.5.-(3) ヘリウムガス検出器による面上検出器の構成。



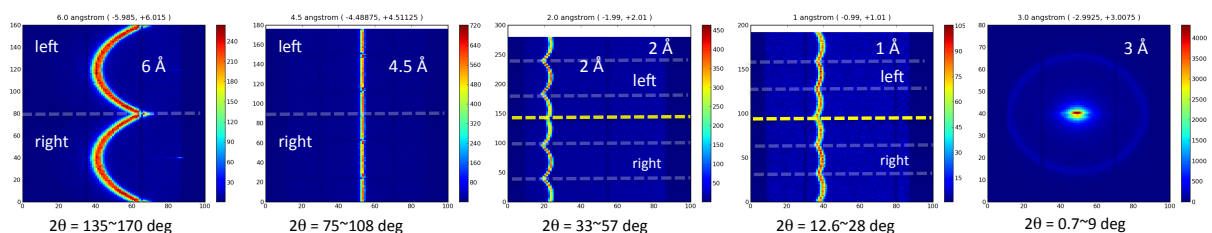
図Ⅲ.2.5-(4) NOVA の検出器配置図。左手側から、小角、20度、45度、90度及び背面検出器バンクを示す。

ヘリウムガス検出器は、上述のとおり、中性子検出を電気信号（電荷）として出力する。ピコクーロン程度の極めて微弱なアナログ信号であり、これを増幅し、デジタル化して計算機上に記録するためのアナログ信号処理回路が必要となる。NOVA では、高エネルギー加速器研究機構（以後、高エネ機構）で長年蓄積された技術により開発され、MLF 標準となっている信号処理回路「NeuNET」[2] を使用することとした。データ集積システムの構成を図Ⅲ.2.5-(5)に示す。検出器（図中 PSD）で測定された中性子は、アンプによる信号増幅とアナログ-デジタル変換を経て、TOF 時間、検出器位置情報、実時間対応指数の3つの値から構成される「中性子検出イベント」として1次メモリー（図中 FIFO Memory）に保存される。その後、TCP/IP モジュールにより計算機に送られ、計算機上の記憶媒体に保存される。これをイベント方式のデータ集積システムと呼ぶ。温度や磁場、雰囲気など試料環境の外場の変化と試料の構造変化を、実時間対応指数により対応させて、時分割測定が可能となっている。



図Ⅲ.2.5.-(5) 中性子検出信号の処理回路概要

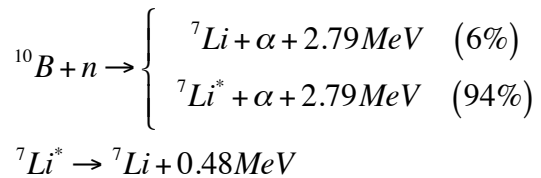
図Ⅲ.2.5.-(6)に各検出器バンクのシリコン粉末の測定強度マップ（横軸を検出器内ピクセル、縦軸を検出器 ID により、熱中性子のシグナルを積分した強度分布）を示す。ただし、小角バンクについてはシリコン粉末でブラッグピークを検出することが難しいので、メソポーラスシリカの 100 面によるブラッグ散乱強度を示した。青色は強度が弱く、赤色が強度の強い箇所を表す。ブラッグ散乱強度が、2次元面でスムーズなカーブとして観測されており、検出器調整が適切であることが確認できる。



図Ⅲ.2.5.-(6) 各検出器バンクの測定強度マップ（横軸を検出器内ピクセル、縦軸を検出器 ID により、熱中性子のシグナルを積分した強度分布を表示）。左上より右に、背面バンク、90度バンク、45度バンク、20度バンク、小角バンクのマップを示す。

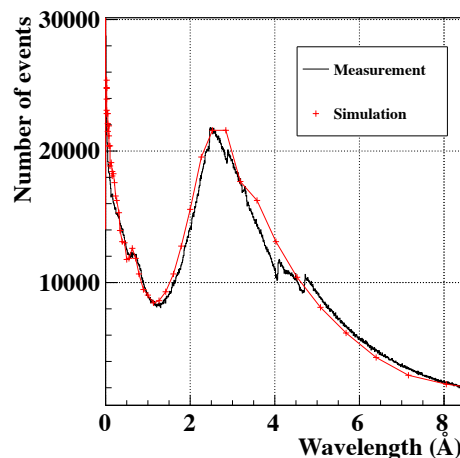
一般に散乱実験では、試料に入射した中性子数と散乱された中性子数を求めることで、散乱断面積を求める。全散乱測定においても、散乱断面積を精度よく求めることが必要になる。そのため、試料に入射する中性子数を正確に計数できるモニターが必要である。NOVA

の場合、1秒間に100万個余りの中性子が試料に入射される。このような大量の中性子を既存の検出器では精度の良く測定することはできない。こうした状況を踏まえ、次世代の検出器として有望なGEM（Gas Electron Multiplier）検出器をベースに、NOVA用の中性子モニターを作り上げた。GEMモニター用の信号処理回路は、高エネ機構の測定器開発室が開発したものを使用した。GEM検出器は、中性子反応 $n(^{10}\text{B},\alpha)^7\text{Li}$ （ボロンが中性子を吸収してアルファ線とリチウム原子核を放出する反応）で生成した荷電粒子を検出するものである。

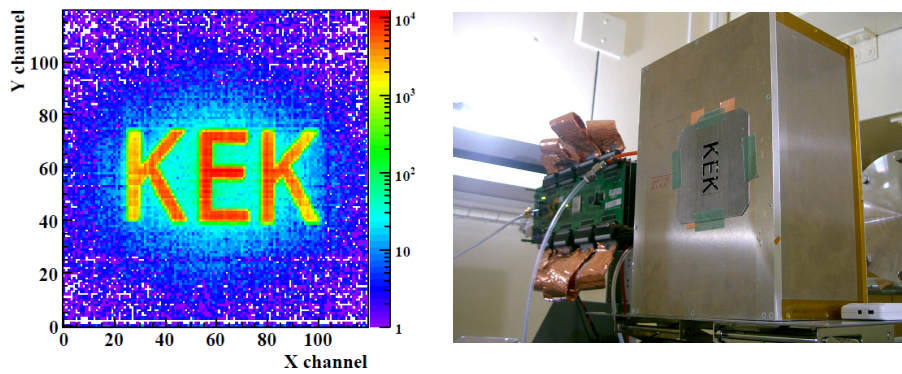


平成20年度には、原子炉中性子源を用いて試作器の試験を実施した。試験結果を踏まえて改良を加え、平成20年12月から平成21年2月までの期間において、BL21の中性子ビームを利用した試験を行い、1MHzの計数率を有していること、検出位置空間分解能がおよそ1mmであること、中性子検出効率が約0.1%であること、図III.2.5.-(7)に示したように飛行時間法によりNOVAでの中性子の波長分布が測定可能であること等、所期の性能を有していることが確認できた。また、GEMモニターは、図III.2.5.-(8)に示すように、検出器平面内の分布（2次元イメージ）を測定することが可能である。

平成22年度において行った測定から、GEMモニターの系統誤差は約0.1%と見積もられている[5]。入射中性子モニターに加え、試料を透過した中性子のモニターも整備した。この透過モニターを使用することで、実験試料の中性子透過率を実測でき、精度の良いデータ補正を行う事が可能となった。



図III.2.5.-(7) GEMモニターにより観測したNOVAの入射中性子分布



図III.2.5-(8) GEM モニターにより観測した中性子。モニター面に「KEK」と文字をくり抜いた中性子遮蔽材を置き(右写真)、2次元のイメージが測定されていることを確認した。

平成 22 年度において行った測定から、GEM モニターの系統誤差は約 0.1%と見積もられている。入射中性子モニターに加え、試料を透過した中性子のモニターも整備した。この透過モニターを使用することで、実験試料の中性子透過率を実測でき、精度の良いデータ補正を行う事ができる。

2.5.1.2 経時変化測定用回路

2.1.1 に記述したように、中性子の検出は、イベントデータという形式により実時間も含めて記録することで、経時変化測定に対応した。測定例は、2.5.3.4.4 及び 2.5.6 に示す。

2.5.2 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)

2.5.2.1 中性子ビーム整形機器製作

ディスクチョッパー (平成 19 年製作)、T0 チョッパー及びフェルミチョッパー (平成 21 年度製作) を据付け、平成 22 年度に中性子ビームを用いた調整を行った。図III.2.5-(9)は設置されたチョッパー群である。写真上方が中性子源で、ディスクチョッパー、コリメーター (黒に塗装した鉄遮蔽)、T0 チョッパー (写真中の箱)、フェルミチョッパー (写真下部の円筒) である。



図Ⅲ.2.5.-(9) 設置された NOVA の中性子ビーム整形機器

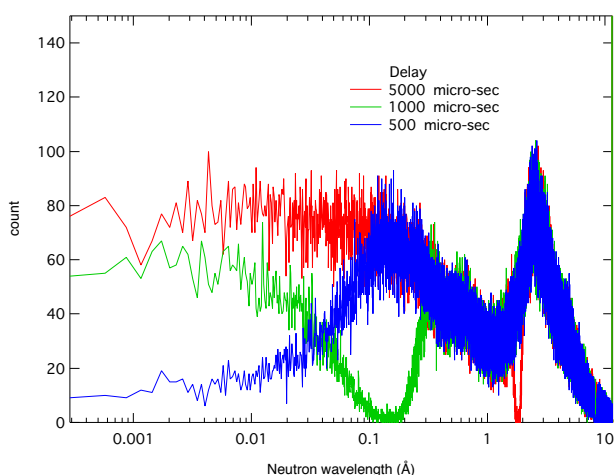
ディスクチョッパーは、パルス中性子源で TOF 実験を行う場合、25 Hz の繰り返しにおいて、速度の低い中性子（波長の長い中性子）が、次のパルス中性子発生後に検出器に到達することを防ぐ機器である。円周の一部に中性子遮蔽材が塗布されたディスクが 25 Hz で回転し、速度の低い中性子を吸収する機構となっている。

フェルミチョッパー[6]は非弾性散乱実験を行うための単色化デバイスであり、全散乱データにおける非弾性散乱項補正のために使用する。通常の実験では中性子ビームから離れたところまで退避する。

T0 チョッパー[7]は、高エネルギー中性子がノイズとなることを防ぐため、高エネルギー中性子が到達する時間のみインコネル製の回転遮蔽体（遮蔽厚さ 30cm）で中性子ビームを遮蔽する機構となっている（図Ⅲ.2.5.-(10)）。T0 チョッパーにより高エネルギー中性子が遮蔽されていることを実測により確認した。図Ⅲ.2.5.-(11)は、回転位相の最適化のため、T0 チョッパーの位相をずらし、入射中性子モニターにより入射中性子の波長分布を実測した結果である。0.12 Å 以上の中性子が使用可能となるように、位相を 500 μs と決定した。位相の揺らぎも仕様通り ±10 μs を達成していることが確認できたため、中性子回折実験での運用を開始した。



図Ⅲ.2.5.-(10) T0 チョッパーの内部。インコネル製のローターは真空中で回転する。



図III.2.5-(11) GEM モニターにより測定した入射中性子分布による T0 チョッパーの遮蔽効果の検証結果。横軸は波長である。位相を 500 μs (青線) とすると、0.12 \AA 以下の中性子が遮蔽されていることが確認された。1000 μs の場合 (緑線) には、T0 チョッパーの遮蔽効果が遅れて現れるために、必要とする波長領域まで遮蔽している。

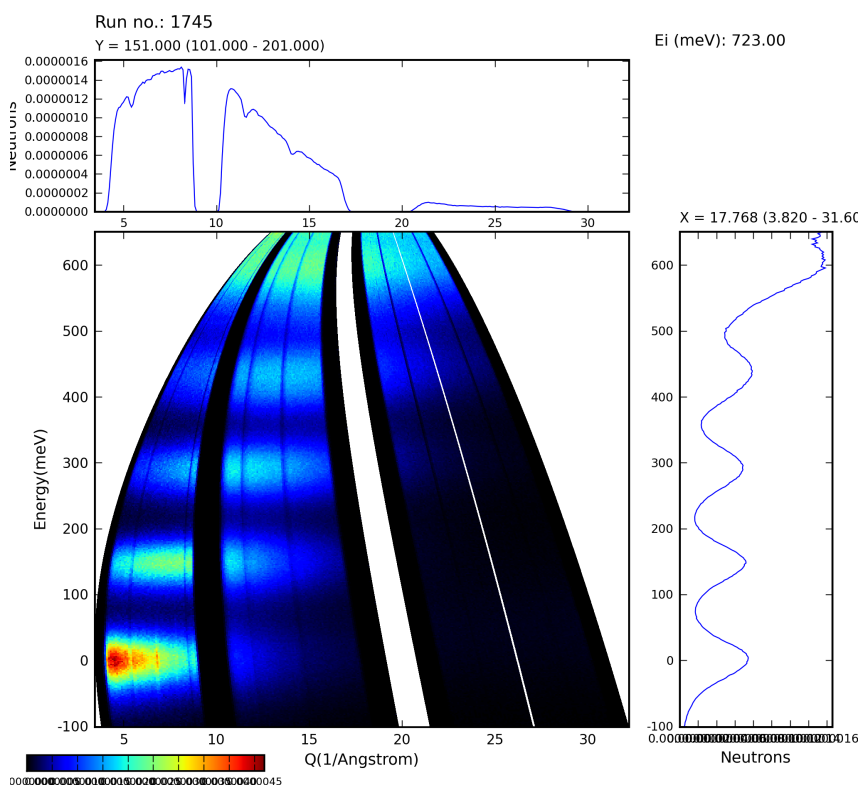
2.5.2.2 水素位置情報の精密解析手法の確立

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という問題がある。つまり、水素位置情報については、水素原子が規則正しく配列している場合以外は、有意な情報を得る事が非常に難しい。このために、通常の中性子回折実験では、重水素 (^2H) に置換して実験が行われる。これは、軽水素と重水素の化学的性質がほぼ同じという前提に立つが、より精度の高い情報を得るためには、化学的性質の違いが無視できない場合がある。そのため、軽水素を用いた場合でも水素位置情報が解析可能となる手法の検討を行った。

非干渉性散乱は、水素原子の核スピンと中性子のスピンの相関により生じる。したがって、水素原子と中性子のスピンを偏極させることで、非干渉性散乱の大きさを変化させることができる。この方法が、物質中の水素の位置と運動に関する構造情報を得るために有効と思われる。偏極中性子の利用について、He-3 中性子偏極フィルターおよびスーパーミラー偏極子等のデバイスについて検討を進めた。とくに、実験試料 (材料) 中の水素の核スピンを偏極させる事が最も重要であるので、山形大とともに、「動的核スピン偏極法」、「NMR-変調中性子散乱」等について検討を進めた。これらの方法は、1K 以下の極低温にする必要がある、試料を均一磁場下に置く必要がある等、試料環境が限定的であることが問題である。偏極中性子を生成するための、He-3 中性子偏極フィルターおよびスーパーミラー偏極子等のデバイスについて検討を行ったが、検出器で検出される中性子数が、偏極しない場合の 1/100 近くに減少してしまい測定精度が下がること、偏極率に波長依存性が生じるため補正の困難さが残ることから、本事業期間内に有効な手法として確立することは

困難であると判断した。

別な方法として、非弾性散乱デバイスによる非干渉性散乱補正についての検討を進めフェルミチョッパー型の非弾性散乱デバイスを導入することとした。フェルミチョッパーの導入により、特定の波長の中性子を選択的に入射し、非弾性散乱実験を行うことで水素原子の反跳効果を見積もることができる。ただし、NOVA は非弾性散乱測定に最適化できていないので、エネルギー分解能 10%~20%程度である。図III.2.5.-(12)に、723 meV (ミリ電子ボルト) を選択した場合の、TiH₂ の非弾性散乱測定データを示す。NOVA において水素の結合状態についての情報を得られることが確認できた。このデータから、水素の弾性散乱ピーク位置から反跳エネルギーを求め、水素の断面積を計算し、バックグランド補正を行う。測定は、平成 23 年 2 月に実施できたが、水素位置情報の精密解析手法の確立までは至らなかった。しかしながら、全散乱測定と非弾性散乱測定の両方を実施可能な装置は他になく、水素貯蔵・放出過程の解明や高性能材料開発に向けた指針の提供に有効と考えている。当初の想定を上回る成果である。



図III.2.5.-(12) NOVA に設置したフェルミチョッパーを用いて測定された TiH₂ の非弾性散乱測定データ。縦軸は、水素の振動エネルギーを示しており、赤に近い色のエネルギーは、そのエネルギーで振動している水素が多いことを示す。水素の振動エネルギーが均等なエネルギー差であることから、水素の振動が調和振動であることを示している。

2.5.3 全散乱装置の研究開発

(高エネルギー加速器研究機構)

平成 19 年度において、中性子検出器の性能として要求される計数率をシミュレーション及び数値計算により求め、位置敏感型ヘリウムガス検出器の採用を決定した。さらに検出器配置の最適化を行い、全散乱真空槽の概念設計を実施し、真空槽製作に着手した。真空槽製作を行い、平成 21 年度 3 月に据付けを完了した。真空槽の製作図面作成は、日本原子力研究開発機構と共同で進めた。

2.5.3.1 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)

平成 19 年度は、検出器配置最適化のため、中性子強度および分解能についてモンテカルロシミュレーションを行った。すなわち、NOVA が設置される 21 番ビームラインの線源データに基づきソースコンポーネントを作成し、試料位置および検出器位置における中性子強度および分解能の計算を行った。その結果、既存のヘリウムガス中性子検出器の性能でも対応可能であることが判明したので、一次元位置敏感型ヘリウムガス中性子検出器を採用する事に決定した。その上で、1) 本装置の背面検出器（後方散乱測定）はリートベルト解析による結晶構造に必要な分解能（0.5%以下）を有すること、2) 検出器は散乱角（ビーム進行方向と試料-検出器を結ぶ直線のなす角度）が 0.8° から 165° に設置されること、3) 利用可能中性子波長範囲は 0.12\AA から 8.3\AA であること、4) 生体遮蔽体内に設置されることによる空間的制限を考慮し短波長中性子を有効利用するために中性子源から試料までの距離をなるべく短くすること、を検討条件として、ヘリウムガス中性子検出器配置の最適化を行った。これらの条件は、全散乱法による構造解析に加えて、高強度粉末構造解析や小角散乱測定も実施可能にするものであり、検討結果を次項 2.5.3.2 の開発に反映させた。

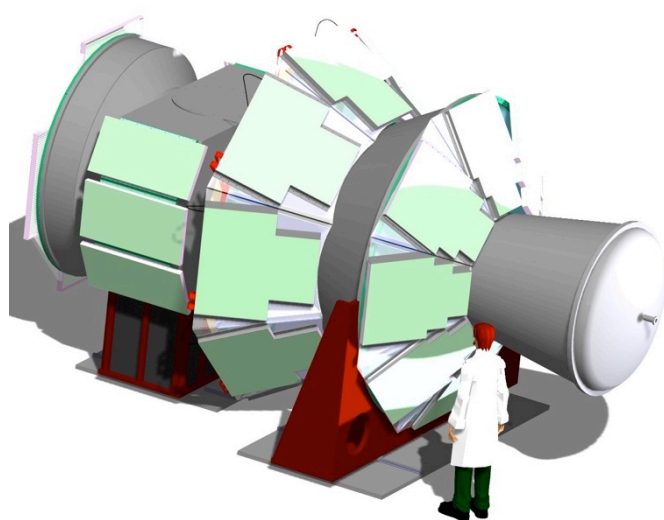
平成 20 年度には、真空槽の製作図面の値を決定するため、検出器位置における中性子強度および分解能をモンテカルロシミュレーションにより評価した。さらに、さまざまな位置における中性子ビームの形状をモンテカルロシミュレーションにより計算し、それらの結果を実測のビーム形状と比較、検証した。その結果、上記の 4 つの条件を満たす配置となったことを確認できた。

2.5.3.2 全散乱装置真空槽の研究開発

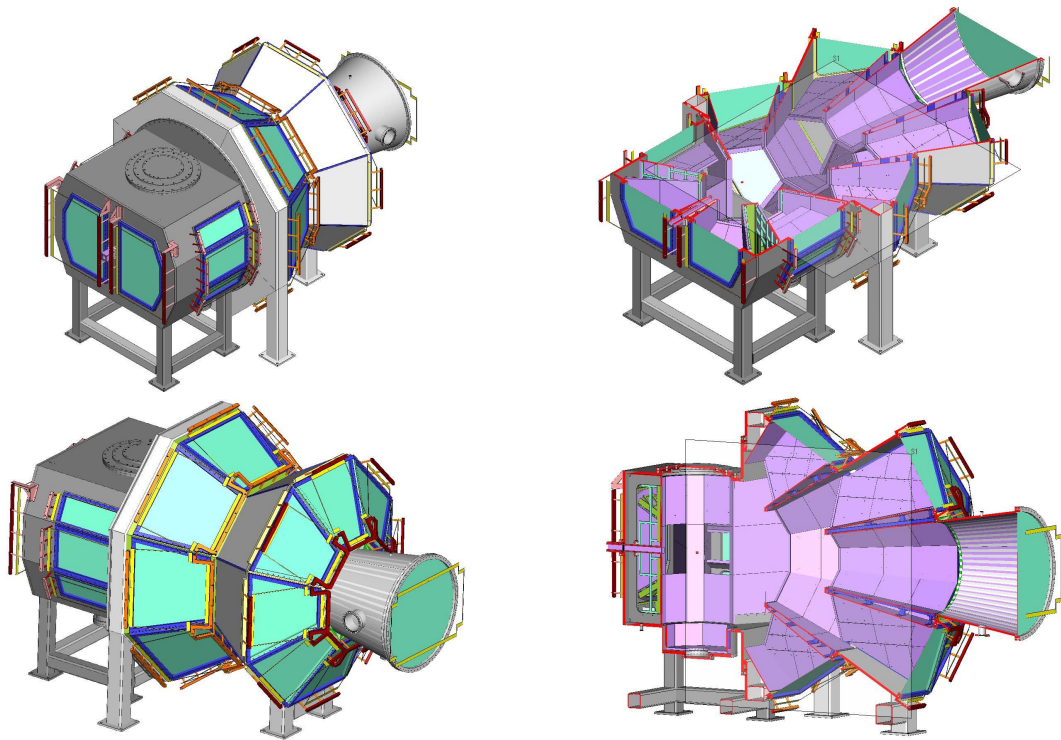
(高エネルギー加速器研究機構)

平成 19 年度は、検出器配置の最適化設計に基づき全散乱装置真空槽の設計を行った（図 III.2.5.-(13)）。ヘリウム-3 ガス中性子検出器の採用に伴い、本検出器の空間分解能（5mm）の制約から試料-検出器間距離を決定した。一方で、高い S/N 比が得られるように真空槽と検出器間の空気相厚さを薄くする必要がある。空気による中性子の散乱は、空気層の厚さが 80cm の場合に約 4%、30cm の場合に約 1.6%、10cm の場合に約 0.5%と見積もられる。空

気層が厚い程、S/N比を下げることになる。計画当初の真空槽形状は、最大で80cmの空気層厚さを許容しており、しかも検出器によって空気層厚が異なっていた。これは真空槽の形状の単純化によるコストダウンを考慮したためである。空気層の低減を軽微な改良で実現することも検討したが、構造が複雑になり、安定性を損なうことが判明した。このため、真空槽の形状が複雑になるが、空気層厚さを小さくし、高性能化することを選択した。平成20年度に行った製作設計の結果を図III.2.5.-(14)に示す。真空槽は、長さ約5m、高さ約3.3m、横幅約3mであり、可能な限り全方位を検出器が覆い、かつ検出器と真空槽間の空気層が10cm以下となるような設計になっている。次に、全散乱測定におけるバックグラウンド低減のための遮蔽体設計を行った。J-PARC中性子源において中性子強度が飛躍的に向上したことを最大限に生かして、従来の中性子施設で精度の点で問題があった微小・微量試料の測定や同位体置換実験などを可能とするためには、バックグラウンドを極力下げるための工夫が必要である。装置設計上で特に考慮しなければならない点は、熱外中性子の散乱から生じるバックグラウンドである。最短の利用波長の0.12 Å (5 eV) よりも波長の短い(エネルギーの高い)入射中性子は、T0チョッパーと呼ばれる遮蔽機器(重量金属塊の高速回転体)により吸収または散乱され、試料に到達しないようにする。T0チョッパーと装置本体の間には、コンクリートと鉄による遮蔽体を配置しており、T0チョッパーが周囲に撒き散らす中性子、ガンマ線のバックグラウンド散乱が装置本体に届かないように遮蔽する。高強度全散乱装置の大立体角の検出器においても、試料から散乱された中性子のみが検出器に達するように適切な中性子遮蔽材として、B₄C(炭化ホウ素)粉で覆われたB₄Cゴムの開発に成功し、全散乱装置の真空槽内壁に装填された。このような遮蔽体を内部にもつ真空槽は、図III.2.5.-(14)に示すような複雑な立体構造となっている。また、ビームサイズは4象限スリットにより20 mm × 20 mm以下で可変としている。真空槽は、平成20年度に製作し、平成21年3月に設置が完了した(図III.2.5.-(15))。



図III.2.5.-(13) 全散乱装置真空槽(概念図) 緑色はヘリウム-3検出器群



図Ⅲ.2.5.-(14) 全散乱装置真空槽の製作設計に基づく 3 次元図



図Ⅲ.2.5.-(15) 全散乱装置真空槽の製作。J-PARC への設置は、平成 21 年 3 月に行われた。

平成 19 年度に、計算機システム、クレーン、真空ポンプを購入し、実験配電盤を製作した。平成 20 年度、平成 21 年度には、キャビン、電源配線、冷却水配管を行った。

2.5.3.3 全散乱装置の性能評価

(高エネルギー加速器研究機構)

平成 21 年 5 月 28 日より性能評価を開始した。様々な標準的試料について全散乱測定を行い、散乱断面積（静的構造因子 $S(Q)$ ）および実空間 2 体分布関数 ($g(r)$) の導出を行った。データ処理ソフトウェアの検証を行うため、複数の再委託先により、それぞれのデータ処理ソフトウェアにより平行してデータ処理を行った。図 III.2.5.-(16) にシリコン粉末による分解能評価を示す。分解能 ($\Delta d/d$) は、背面バンクが 0.28%~0.38%、90 度バンクが 0.4%~0.7%、45 度バンクが 0.7%~1.2%、20 度バンクが 1.3%~2.8% の検出器の分解能が、ほぼ設計値である 0.6% であることを確認した。指数の異なる反射ごとに見積もっており、 d 値の大きい反射についてはパルス幅の大きな長波長中性子を用いるために、分解能が悪くなる。また、散乱角の小さなバンクになるほど、角度分解能の寄与が大きくなるため、分解能の d 値依存性が小さくなる。

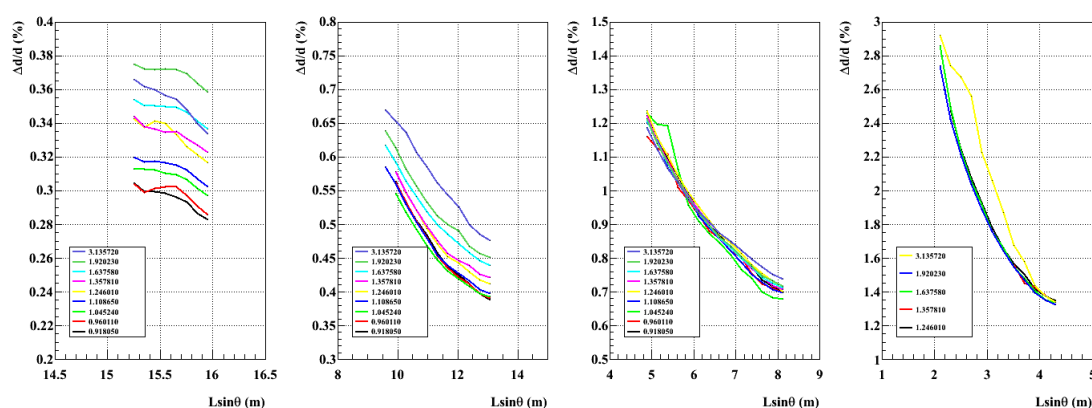
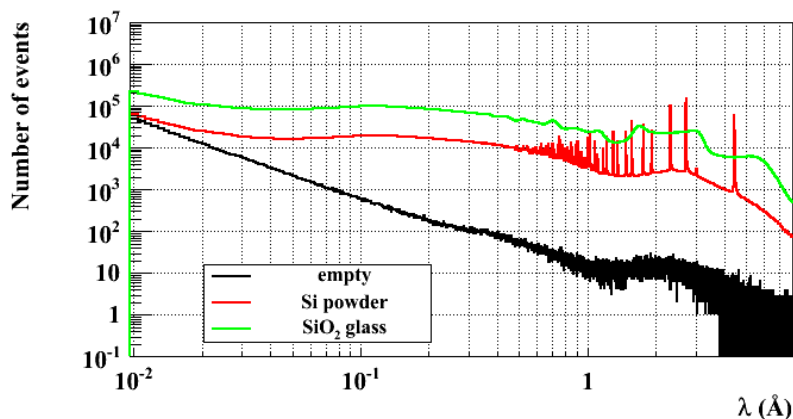


図 III.2.5.-(16) NOVA により測定されたシリコン粉末のブラッグピーク幅から見積もられた分解能。左から、背面バンク、90 度バンク、45 度バンク、20 度バンクを示す。

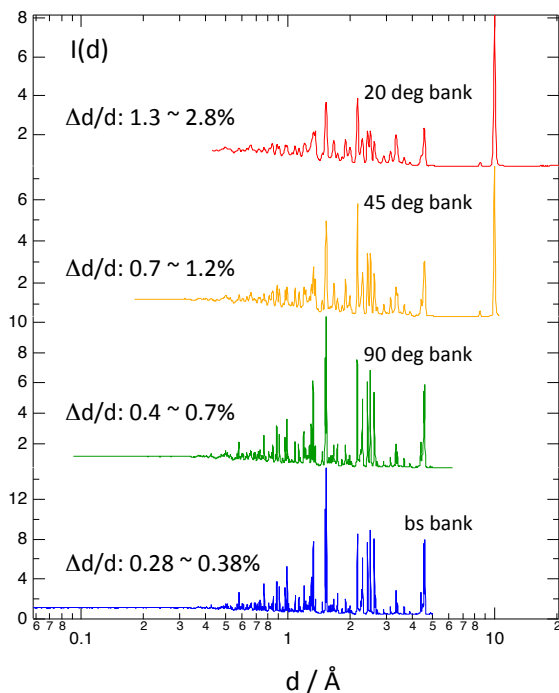
また、装置のバックグラウンドが十分に低いことも確認できた（図 III.2.5.-(17)）。NOVA が使用する波長範囲（0.12 Å 以上）で、バックグラウンドレベルは試料からの強度の 1/100 以下である。シリカガラスの場合には、1/1000 程度であり、試料量を現在の 1/10 程度、つまり 100 mg 程度にしても測定が可能であることを意味する。シリコン粉末についても、ブラッグピーク強度に比べると 1 万分の 1 程度である。また、ブラッグピークの裾野付近の強度と比べると 1/100 程度である。これは、0.1 mm 厚さのバナジウム製試料容器からの散乱強度であり、NOVA 本体からのノイズレベルは極めて低いことが確認された。このようなバックグラウンドノイズレベルの低さは、微量試料の測定に有効である。



図III.2.5-(17) NOVA のバックグラウンドレベル。

測定領域

標準試料 (NIST Mica) による測定例を図III.2.5-(18)に示す。検出器バンク毎に測定データ (回折プロファイル) を足し合わせたもので、それぞれの検出器バンクの測定 d 領域 (d は格子定数) を表している。ただし、特定の検出器ピクセルの d 値を横軸としているため、実際の測定領域よりも若干狭くなっている。とくに小角 (small-angle) バンクの long- d 側が狭まっている。散乱角度が大きい程、分解能が高くなるため、背面検出器 (Back scattering) バンクのピークが最もシャープになる。角度が小さい程分解能は低くなるが、より d 値の大きな構造を測定できる。図III.2.5-(18)のような広い d 領域を一挙に測定できる点が NOVA の特長である。



図III.2.5-(18) Mica により検証された NOVA の測定 d 領域。

また、小角バンクを用いることで、240 Å 程度までの d 値の測定が可能である。図 III.2.5.-(19)は、メソポーラスシリカ (MCM-41) のハニカム構造により生じるブラッグ散乱を NOVA 小角散乱バンクで観測したものである。

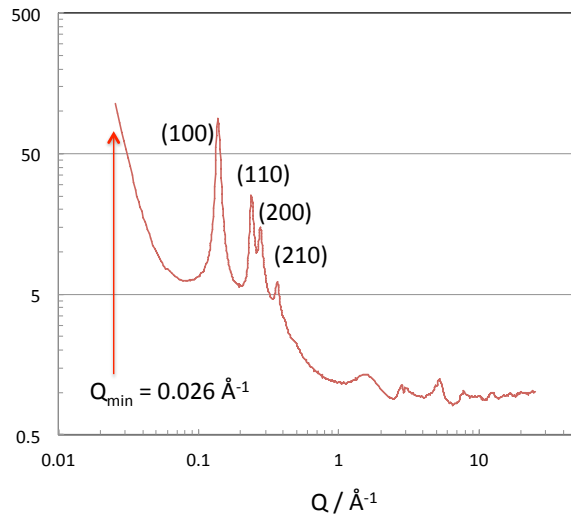


図 III.2.5.-(19) メソポーラスシリカ (MCM-41) により検証された NOVA の小角散乱測定領域。

測定強度

図 III.2.5.-(20)に、ダイヤモンド粉末、シリコン粉末、シリカガラスについて、90度バンクで1秒間測定したデータを示す。補正は行っていない。試料によっても測定強度は異なるが、単純な構造の変化であれば、十分に観測できると考えられる。NOVAでの標準的な試料量は、0.6cc ~ 1ccである。また、この測定時のJ-PARC陽子加速器のパワーは120 kWであり、1 MWに向けてパワーが増加した際には、測定時間は1/8程度になることになる(平成24年4月時点でのパワーは200 kW)。測定時間の短縮が必要でない場合には、NOVAのバックグランドレベルが低いため、試料の量を減らすという選択肢をとることが可能である。

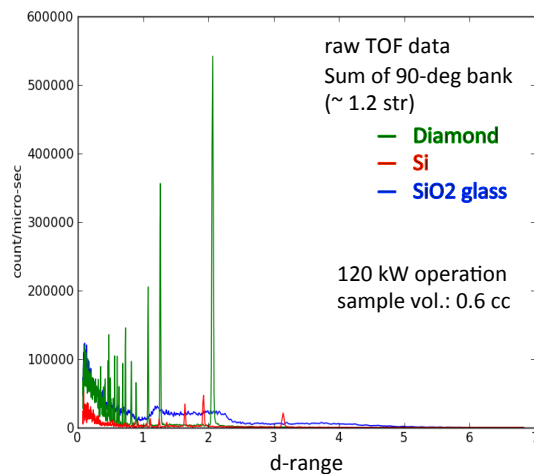
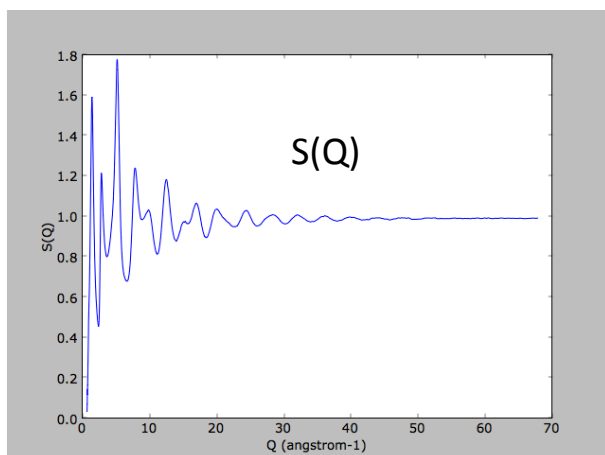


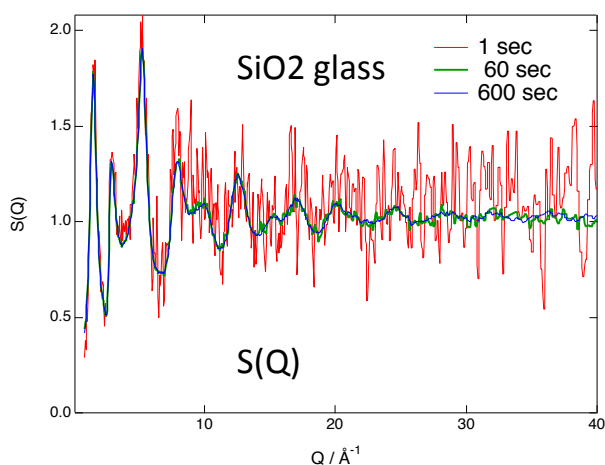
図 III.2.5.-(20) 標準試料の1秒間測定データ

図Ⅲ.2.5.-(21)に、各種補正を完了した SiO₂ ガラスの $S(Q)$ を示す。測定時間は、8 時間である。平滑化処理は行っておらず、データの平滑さから十分な統計精度が得られていることがわかる。



図Ⅲ.2.5.-(21) SiO₂ ガラスの $S(Q)$ (8 時間測定)

図Ⅲ.2.5.-(22)に、SiO₂ ガラスの測定時間毎の $S(Q)$ の精度の比較を示した。これによれば、60 秒程度で、 $S(Q)$ の概要を知るのには十分な統計精度が得られている。J-PARC 加速器のパワーが 1 MW を達成した場合には、SiO₂ ガラスの $S(Q)$ 測定時間は数秒から数分で可能と見積もることができる。



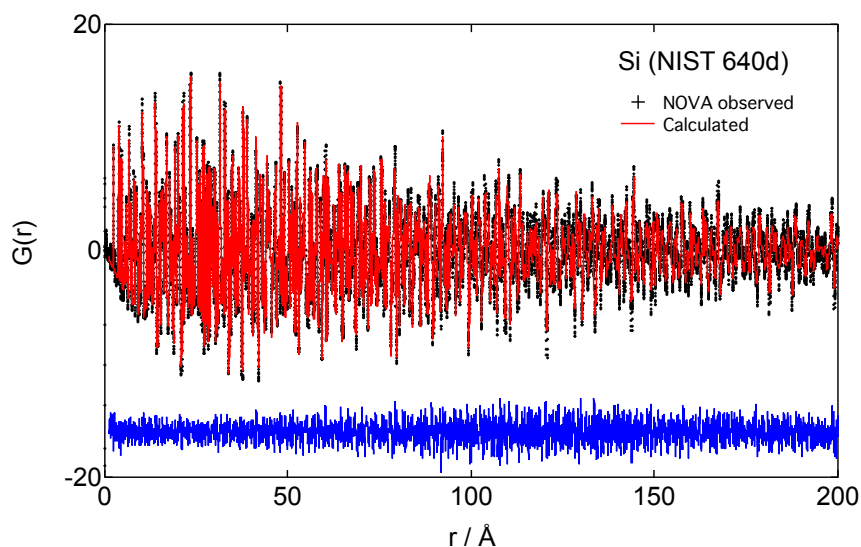
図Ⅲ.2.5.-(22) SiO₂ ガラスの NOVA90 度バンクにより測定された $S(Q)$ の測定時間依存性。

2.5.3.3.1 PDF(pair distribution function:2 体分布関数)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)

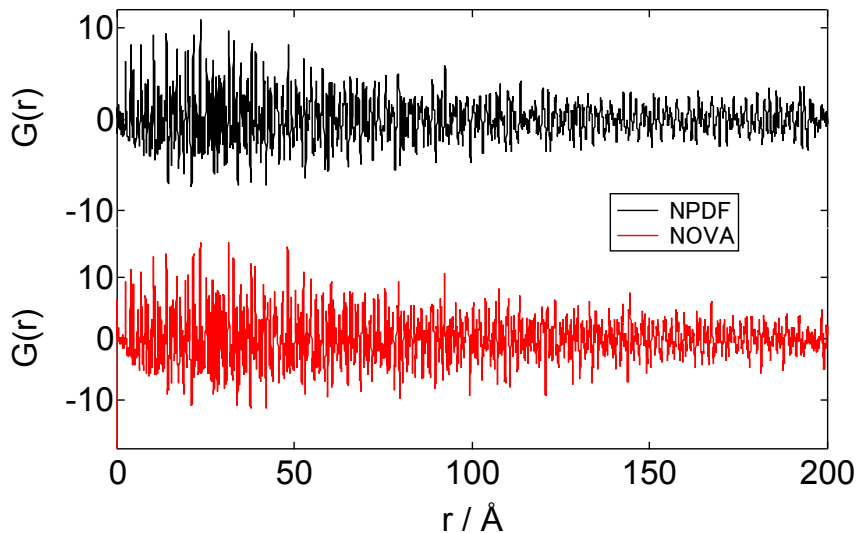
シリコン標準試料 (NIST 640d) のデータについて、NOVA において開発したソフトを用いて原子対相関関数 $G(r)$ を導出している (図Ⅲ.2.5.-(23))。200 Å までピーク構造がはっきりと観測されている。 $S(Q)$ に対してリートベルト解析 (使用ソフトウェア: Z-Rietveld[8, 9])

を行って得られた結晶パラメータをもとに $G(r)$ を計算し (使用ソフトウェア: PDFgui[10])、最適化することが可能になっており、結晶 PDF 解析が可能であることが実証された。



図III.2.5.-(23) NOVA 用に開発したソフトウェアにより導出された $G(r)$

ロスアラモス国立研究所 LANSCE にある粉末回折装置 NPDF は、結晶 PDF 法による結晶構造解析が長年にわたり広く行われてきている確立された装置である。そこで、NOVA の性能を調べるために、NPDF の結果と比較した (図III.2.5.-(24))。NPDF も NOVA も散乱角の小さな位置に配置された検出器の Q 分解能は低いため、散乱角の大きな検出器のみを使うことで分解能を高くすることが可能であるが、データの統計精度を確保するために、分解能の低い検出器を使わざるを得ない場合がある。同じ散乱角の検出器を比較すると、NPDFの方が数倍高い分解能を有するので、より r の大きな $G(r)$ まで測定可能である。しかしながら、図III.2.5.-(24)が示すように、NOVA のデータは NPDF と遜色ない。これは、NOVA が分解能の高い検出器のみを使っているためである。つまり、高強度であることが、PDF 解析の性能を向上させていることが実証された。水素化物の PDF 解析については、2.5.5.2.2 において行った。



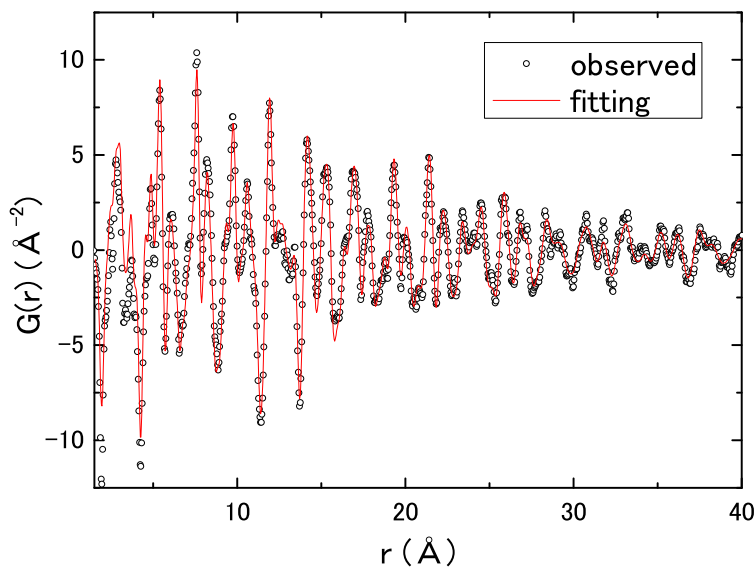
図III.2.5-(24) NOVA および NPDF により観測された Si 粉末の $G(r)$ の比較

2.5.3.3.2 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)

水素貯蔵材料の反応速度を向上させるために粒子サイズを小さくするナノ粒子化がしばしば行われる。ナノ粒子の場合、原子対相関距離と粒子サイズが同程度になるため、バルクの場合と比べ $G(r)$ の強度は r の増大とともに減衰する。また $G(r)$ の減衰は装置分解能によっても生じる。プログラム PDFgui では、球状ナノ粒子の粒子サイズおよび装置分解能による減衰効果の双方をパラメータとしてデータ解析を行うことができるが、粒子サイズによる減衰効果を正確に求めるためには 2 つの減衰効果を分離する必要がある。そこでまずはバルクの Al_2O_3 標準試料を用いて、NOVA の 90 度バンクでの装置分解能による減衰パラメータを決定した。そのパラメータを固定しさらに球状粒子を仮定して、 TiO_2 ナノ粒子の粒径をパラメータとしてフィッティングを行った (図III.2.5-(25))。得られた粒径は 7.3 nm であり、電子顕微鏡で観測された値 (約 7 nm) とよく一致している。

以上よりナノ粒子化した場合の構造解析も可能であることが実証された。



図Ⅲ.2.5.-(25) NOVAにより観測されたTiO₂ナノ粒子のG(r)

2.5.3.3.3 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)

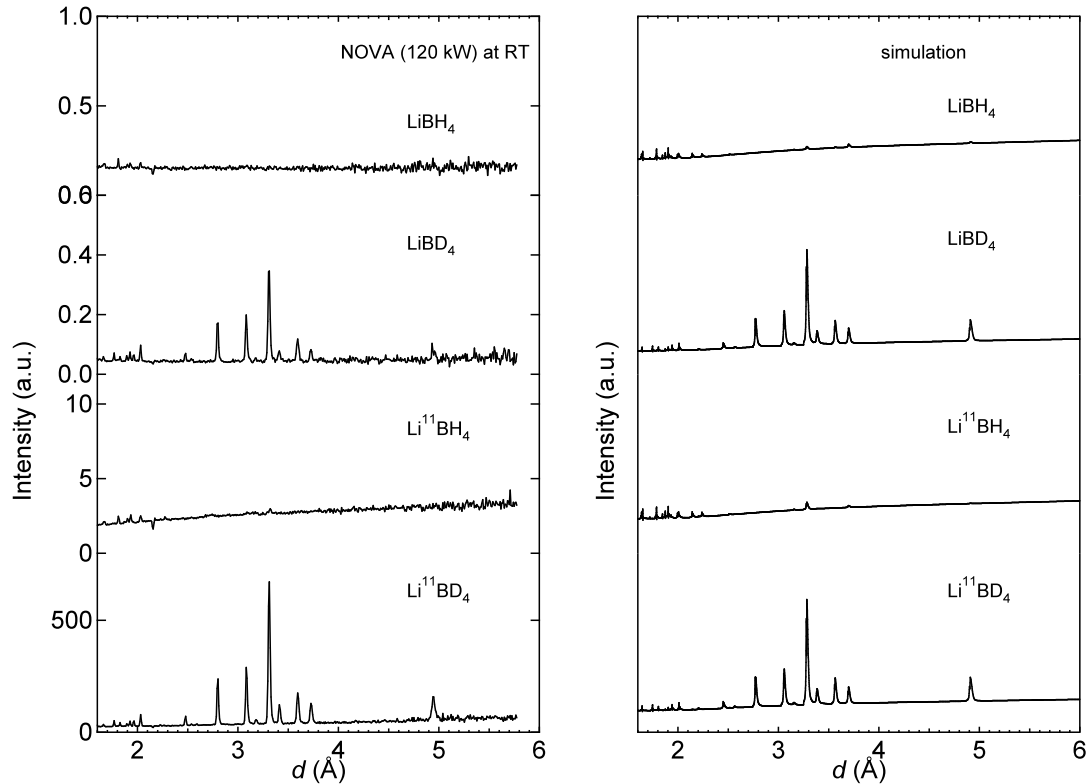
水素貯蔵非晶質金属であるAlD₃の構造解析を行い、結晶とは異なる単範囲構造を有していることを明らかにした。株式会社本田技術研究所との共同研究である。

(以下、詳細は非公開情報)

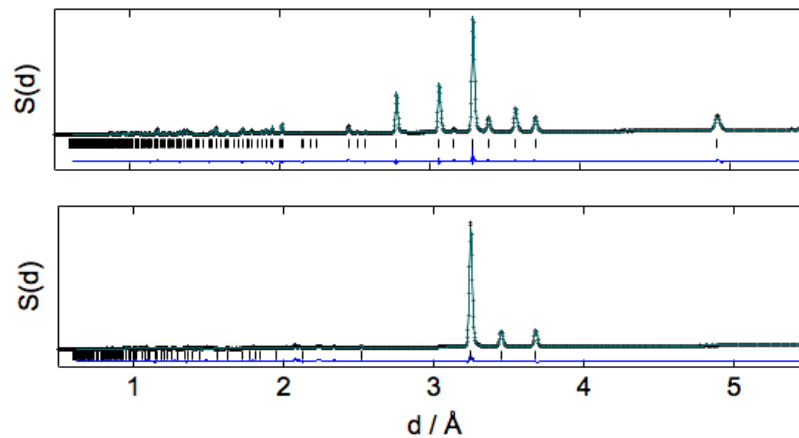
2.5.3.3.4 イオン伝導物質をモデル物質に用いた構造解析による全散乱装置性能の実証

(高エネルギー加速器研究機構)

水素貯蔵材料としても注目されているLiBD₄について、構造解析を行った。¹¹BやDによる置換を行い、Dによる置換が中性子による構造解析に十分な統計精度を得る上で有利であることがわかった(図Ⅲ.2.5.-(28))。図Ⅲ.2.5.-(29)にLi¹¹BD₄のリートベルト解析結果を示す。

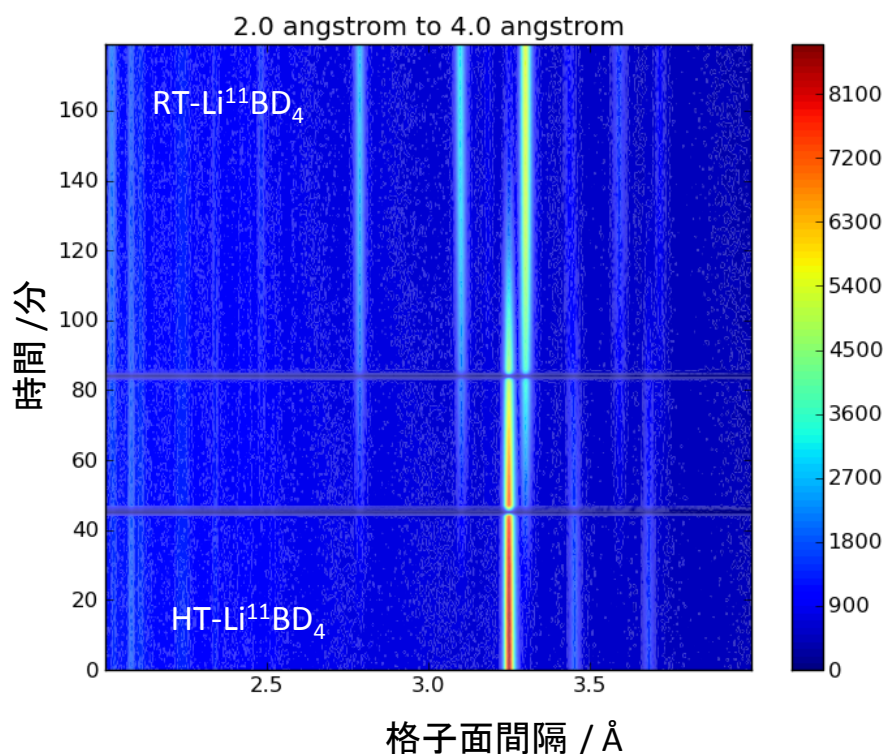


図III.2.5-(28) LiBH_4 の元素を同位体置換した場合の中性子回折パターン。左図がNOVAによる実測で、右図が中性子に対する散乱断面積を考慮して計算した回折パターン



図III.2.5-(29) $\text{Li}^{11}\text{BD}_4$ の低温相（上図）と高温相（下図）のリートベルト解析結果

また、 $\text{Li}^{11}\text{BD}_4$ の昇温・降温実験から相転移過程における回折曲線の変化を測定した。特に、1分単位の時間分解能でも、十分な統計精度で構造相転移の情報が得られることがわかった（図III.2.5-(30)）。

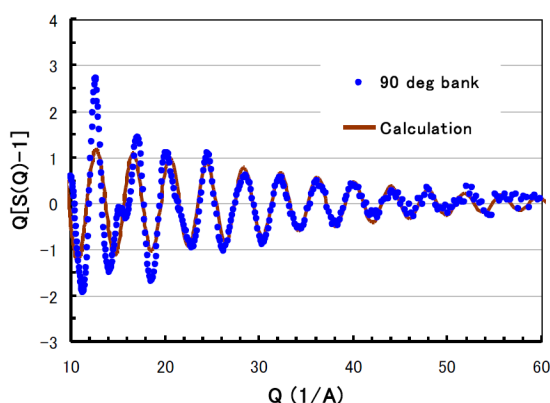


図III.2.5.-(30) $\text{Li}^{11}\text{BD}_4$ の昇温・降温実験により得られた中性子回折プロファイル。温度が時間変化するのに追従して、高温相から低温相への転移が観測されている。

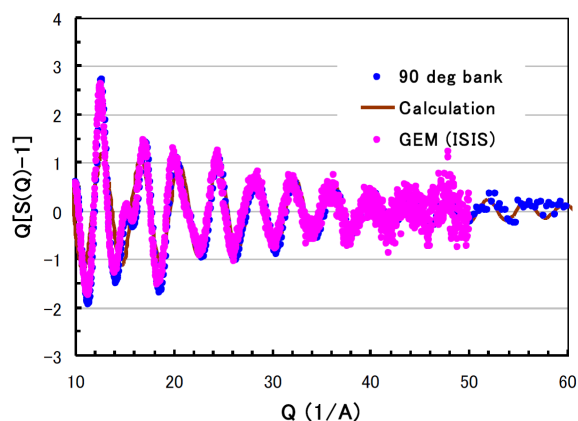
2.5.3.3.5 酸化物ガラスをモデル物質に用いた構造解析による全散乱装置性能の実証

(再委託：日本原子力研究開発機構)

SiO_2 ガラスの NOVA での測定および従来の測定結果に基づく計算との比較によって、NOVA 分光器の精度を確認し、その性能実証を行った。 SiO_2 ガラスは、 SiO_4 四面体を構造ユニットとし、構造ユニットが無秩序な配向しながら頂点共有した原子配置をしている。このような構造の解析が可能になれば、錯体系水素化物において、錯イオンが無秩序な配向を取る場合の構造解析に有用と考え、 SiO_2 ガラスをモデル物質として性能検証を行った。



図III.2.5.-(30) SiO₂ガラスのNOVA90度バンクのデータとSi-O部分構造因子(計算)との比較



図III.2.5.-(31) SiO₂ガラスのNOVA90度バンクのデータとISIS-GEMのデータとの比較

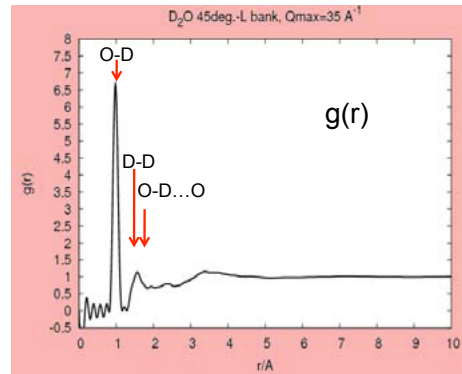
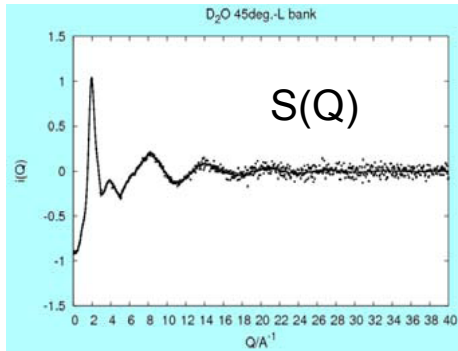
その結果、SiO₂ガラスのSi-O部分構造因子の従来結果に基づく計算とNOVAデータの比較から、Si周りのOの配位数3.85、Si-Oの距離1.605 Åを得た。これは従来の最も信頼できる値(ISIS LADによる3.85 Å、1.608 Å)に極めて近いものである。図III.2.5.-(30)に示したようにNOVAのデータは $Q = 60 \text{ \AA}^{-1}$ まで極めてよく計算値を再現しており、図III.2.5.-(31)で比較しているISIS-GEMの統計精度、 Q 範囲を凌駕していることが明白である。これはランダム系物質としては標準的なSiO₂ガラスの $S(Q)$ のチャンピオンデータを得たこと、またNOVAが(J-PARCの中性子強度を含めて)世界最高レベルの性能を持っていることを示している。

2.5.3.3.6 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)

水素原子を多量に含んだ液体試料の場合には、正確な $S(Q)$ を得るためには、軽水素原子の非弾性散乱効果の補正を行う必要がある。代表的な試料として、液体D₂Oについて、45度バンク検出器から得られた散乱データについて解析を行った。同じ散乱角、試料-検出器距離のPSDピクセルを合計した80本のデータについて、不良なデータの選別、吸収補正、⁰H₂Oの散乱データを用いた非弾性散乱補正[11]を施した後に、 $\Delta Q = 0.05 \text{ \AA}^{-1}$ の間隔でデータの合計、平均化を行い、 $0.4 \text{ \AA}^{-1} < Q < 40 \text{ \AA}^{-1}$ の範囲で良好な構造因子 $S(Q)$ の導出に成功した(図III.2.5.-(32))。

Q の上限 $Q_{\max} = 36 \text{ \AA}^{-1}$ でフーリエ変換を行い得られた $g(r)$ は従来報告されている結果と比較して格段に r 分解能が優れていることが明らかになった(図III.2.5.-(33))。



図Ⅲ.2.5.-(32) 液体 D_2O の構造因子 $S(Q)$ 図Ⅲ.2.5.-(33) 液体 D_2O の 2 対分布関数 $g(r)$

2.5.3.3.7 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)

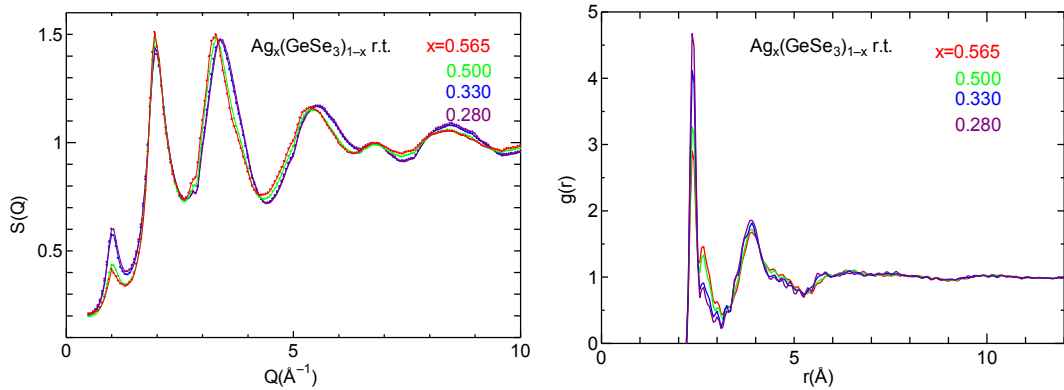
テトラヒドロフラン (THF) を 0.1%程度添加することで、水溶液が 50 気圧で水素ハイドレート形成することが知られている。したがって、THF がどのようにハイドレート形成を促進しているか、ということが原子レベルで観測できれば新たな水素貯蔵材料の開発指針を与えることが期待できる。そこで、軽水素原子を多量に含んだ液体のモデルとして、THF-水混合溶液(10 mol% THF)について構造解析を行った。THF のアルキル基、ならびに水分子の H/D 置換を行った 7 つの同位体置換試料を調製し、室温にて測定を行った。軽水素原子の非弾性散乱効果の補正には 0H_2O を用いた方法を適用した。2.5.5.2.7 に記述した経験的ポテンシャルに基づくシミュレーション結果との比較から、軽水素原子を多量に含んだ THF-水混合溶液についても、妥当な $S(Q)$ が得られる事が確認できた。

2.5.3.3.8 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：日本原子力研究開発機構)

水素貯蔵材料において水素-水素間の相関は、水素の吸蔵限度を決める大きな因子になっている可能性が高い。結晶やガラス物質の中で部分相関を決定するための実験的手法を確立するため、 $Ag_x(GeSe_3)_{1-x}$ 超イオン伝導ガラスの構造測定を行い、カチオン-カチオン分布を決定を試みた。NOVA での測定データから、 $Ag_x(GeSe_3)_{1-x}$ 超イオン伝導ガラスの $S(Q)$ および $g(r)$ を得ることができた (図Ⅲ.2.5.-(34))。Ag が 5.2 eV 付近に共鳴吸収断面積を持つため、試料による吸収補正に時間を要したが、吸収補正処理の妥当性を検証することができた。

リバースモンテカルロ法[12]によって 3 次元原子配置の構造モデルを得る予定であったが、補正処理の確立が遅れたため、モデル構築に達しなかった。



図III.2.5.-(34) $\text{Ag}_x(\text{GeSe}_3)_{1-x}$ の構造因子 $S(Q)$ (左図) と 2 対分布関数 $g(r)$ (右図)

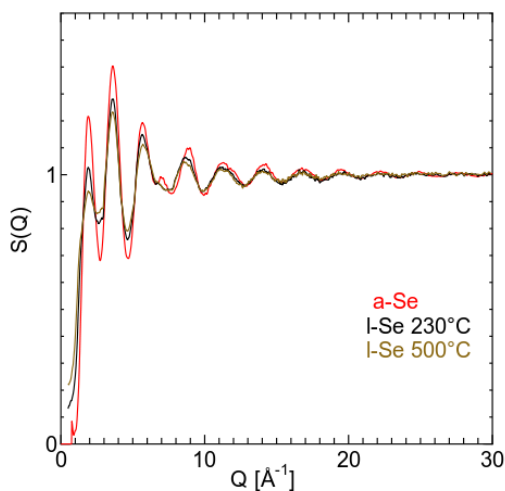
2.5.3.3.9 液体金属、半導体金属等のモデル物質を用いた構造解析による全散乱装置性能の実証

(再委託：新潟大学)

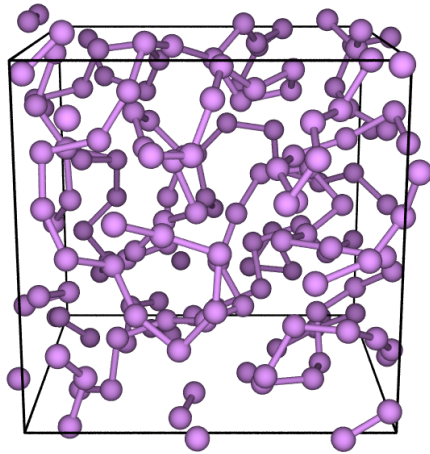
水素貯蔵材料における空隙の評価は、水素貯蔵メカニズムの理解に重要であるが、数 Å 程度の大きさの空隙の評価は容易ではない。これまで液体セレンに適用した方法を、アモルファス・セレンに適用し、空隙の評価を試みた。

測定した $S(Q)$ の振幅の温度変化は予想通りであり、アモルファスでは液体と違って 3 つ目のピークのあとの谷にはっきりと小さい盛り上がりが見測された (図III.2.5.-(35))。この特徴は他の測定例を一致しており、 $S(Q)$ の測定と解析は妥当であることが実証された。液体セレンは、過去に高エネ機構中性子研究施設において測定したものである。

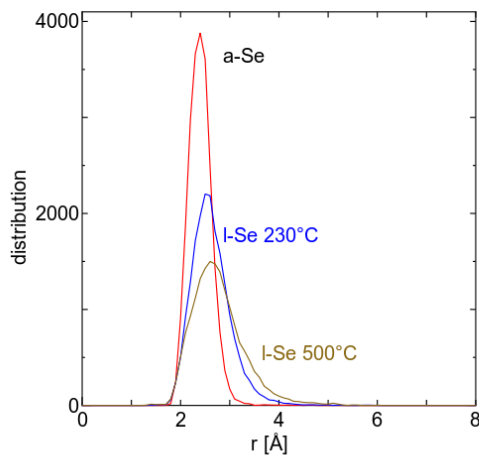
リバースモンテカルロ法にて構造モデルを作成したところ、鎖状の Se のつながりが見える。構造モデルの 8000 個の Se 原子のうちほとんどが結合していることがわかった (図 III.2.5.-(36))。また、空隙の大きさ分布を解析した結果を図III.2.5.-(37)に示すが、液体と比べて小さいサイズ (~ 2.2 Å) の鋭いピークとなっており結晶に近い構造 (螺旋鎖中心で環は少ない) 示唆する結果となった。



図III.2.5.-(35) NOVA により測定したアモルファス・セレン (a-Se) と液体セレン



図III.2.5.-(36) リバースモンテカルロ法により構築したアモルファス・セレンの構造モデル



図III.2.5.-(37) RMCにより構築した構造モデルから評価した空隙の大きさ。

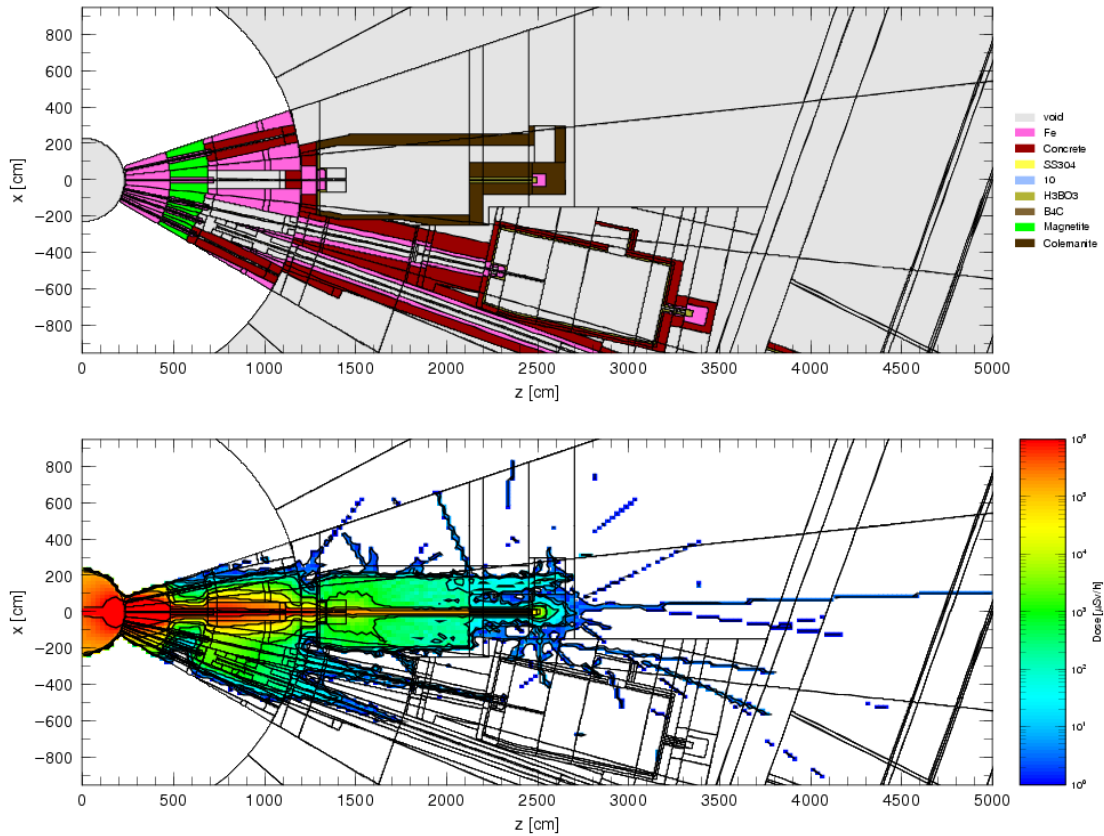
2.5.4 放射線安全設備の建設

(高エネルギー加速器研究機構)

中性子は放射線であるため、まず第1に環境への影響を考慮する必要がある。そのため、NOVA 本体真空槽を取り囲むように、中性子遮蔽体を日本原子力研究開発機構との密接な連携のもとに平成19年より設計し、平成20年5月に据付けを完了した。NOVA 本体へのアクセスのためには、中性子遮蔽体内に入域することが必要で、中性子発生時に入域することを防ぐインターロックの設置を平成20年11月に完了した。

中性子遮蔽は、コンクリート、鉄およびホウ素が用いられる。ホウ素は熱中性子吸収元素であり中性子遮蔽として有効であるがエネルギーの高い熱外中性子の遮蔽には適さない。コンクリートは高エネルギー中性子のエネルギーを下げる役割があり、鉄はガンマ線の遮蔽とコンクリートで低エネルギー化した熱外中性子の遮蔽を行う。

J-PARC 加速器がフルパワーで運転されることを想定し、他のビームラインへの影響も考慮しつつ、粒子（中性子・光子）輸送計算により生体遮蔽体表面での線量が 0.6 mSv/hr 以下であると見積もられた（図III.2.5.-(38)）。放射線安全評価は、J-PARC 放射線等安全検討委員会で認められた PHITS(NMTC/JAM)コードが使用されている。図III.2.5.-(39)に NOVA 中性子遮蔽材設置作業の様子を示す。



図III.2.5.-(38) PHITS コードによる中性子全散乱装置 NOVA の放射線レベル計算。



3

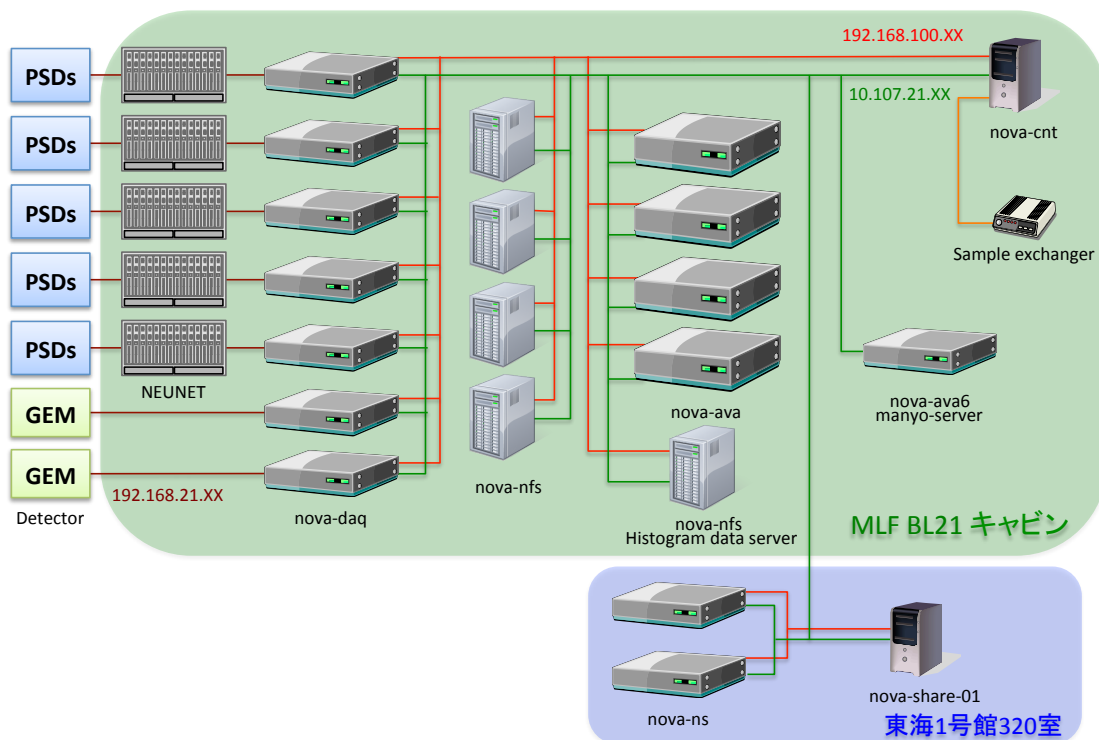
図III.2.5.-(39) NOVA 中性子遮蔽材設置作業の様子。

2.5.5 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)

NOVA で取得される中性子回折データは、最大で 33 MByte/sec = 2.9 TByte/day にも達する。データ量は、J-PARC 陽子加速器の運転パワーにほぼ比例し、現状は最大の 1/10 程度である。このようなデータ量进行处理するため、21 台の計算機を使用している。図III.2.5.-(40) に NOVA 計算機構成を示す。

中性子検出イベントデータを漏れなく計算機上に保存するため、検出器バンク毎に 1 台のデータ集積専用の計算機 (図III.2.5.-(40)中 nova-daq) が割り当てられている。これらの計算機が、中性子検出器システムを監視しながら、信号 (イベントデータ) を収集し、ネットワークを介してストレージに保存する (図III.2.5.-(40)中 nova-nfs)。このデータ集積制御には、高エネ機構で J-PARC 用に開発された DAQ-middleware を使用している[13]。サーバー上のデータは、データ補正及び解析専用の計算機によりデータ処理される (図III.2.5.-(40)中 nova-ana)。データ集積や補正は、1 台の計算機 (図III.2.5.-(40)中 nova-cnt) により制御される[14]。さらに 4 台の構造解析用計算機を導入し、中性子全散乱データの解析の効率を上げるための設備を整えた。J-PARC 物質生命科学実験施設において開発されたシステムを活用し、短期間で効率的に運用開始することができた。



図III.2.5.-(40) NOVA の計算機構成図。左端の PSD および GEM は、それぞれヘリウムガス検出器、GEM モニターを意味する。

2.5.5.1 装置制御ソフトウェアシステム開発

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している。平成 21 年 2 月に試験運用を行い、良好な結果を得た。これを踏まえて平成 21 年 5 月より、NOVA での中性子回折実験のための運用を開始した。室温測定において、試料交換を自動で行うシステムを構築できた。

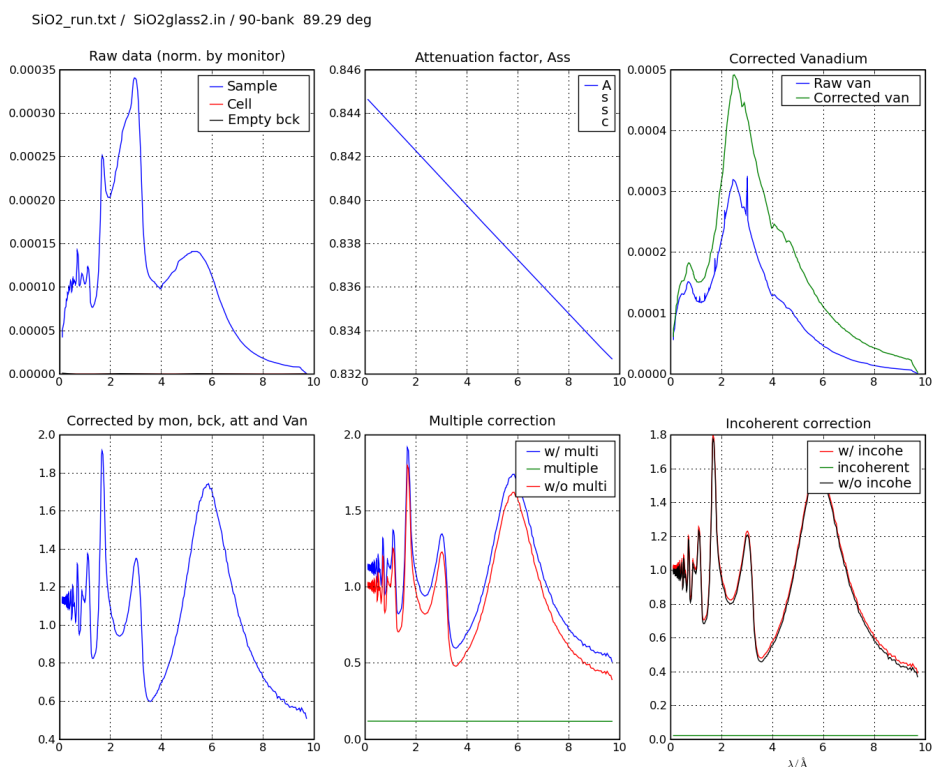
2.5.5.2 データ解析ソフトウェアシステム開発

NOVA では、加速器駆動型パルス中性子源の特性を生かし、試料に入射された白色中性子の波長を飛行時間法により解析している。様々な波長依存性を補正して始めて回折パターンの解析が可能になるが、処理が複雑で、かつデータサイズが数ギガバイトにのぼるため、処理速度を考慮しつつ、信頼性の高い処理を可能にするデータ解析ソフトウェアシステムが不可欠である。

データ処理ソフトウェアは、MLF において標準化されているデータ処理ソフトウェアライブラリ（万葉ライブラリ、Manyo-lib[15]）を使用して、NOVA 用に静的構造因子 $S(Q)$ 導出ソフトウェアを開発した。再委託先と連携して、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開発を行った。基本言語は、C++及び Python 言語であり、計算負荷が大きい処理については、C++言語により並列化処理を行っている。

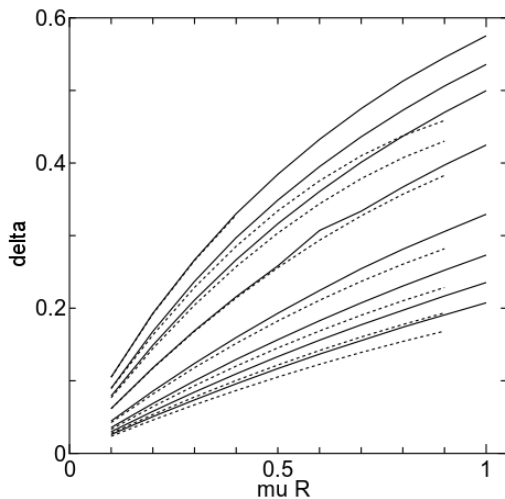
データ処理は、データ補正とデータ解析の二つに分類される。データ補正では、バックグラウンド補正、入射中性子分布補正、中性子吸収係数補正、検出効率補正、検出器立体角

補正、多重散乱補正、非干渉散乱補正等を行う。図Ⅲ.2.5-(41)は、各種補正が適切に行われている事を確認するために、データ補正ソフトにより出力されるもので、SiO₂ ガラスの補正の様子を示している。水素が多い試料では、非干渉性非弾性散乱の効果を補正する必要がある。NOVA では、散乱理論に基づく補正值の計算、H₂O-D₂O 溶液を用いた実験的な補正值の導出による補正の他に、フェルミチョッパーを用いた非弾性散乱実験値による補正を検討した。上記の補正を完了した後、PDF 解析やリートベルト解析を行うシステムを整備した。



図Ⅲ.2.5-(41) データ補正ソフトウェアにより出力される補正結果の概要を把握するための図示例。横軸は、中性子波長である。

2.5.3.3.9 に記述したアモルファス・セレンの解析による性能検証を進める上で、多重散乱補正プログラムの作成が必要となったため、平成 22 年度に作成した (新潟大学)。中性子が試料によって散乱されるとき、試料を通過する前に 2 回以上散乱される場合がある (多重散乱)。このような散乱を受けた中性子は試料の構造情報を正しく表わさないためデータ解析の際は取り除く必要がある。これまでは以前の Blech & Averbach による論文[16]によって解析をしてきたがその精度についてあまり検討されていない。さらに、水素貯蔵材料の場合には、水素量が多くなるために試料の散乱断面積が大きくなり、多重散乱の評価が重要となる。そこで、多重散乱の評価をモンテカルロ法により計算するプログラムを作成し、精度のよい計算であることを確認した (図Ⅲ.2.5-(42))。多重散乱について得られた結果は NOVA での多重散乱補正プログラムに組み込まれている。



図III.2.5-(42) 円筒形試料の多重散乱の計算結果。実線：本計算、点線：Blech & Averbach による値

2.5.5.2.1 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

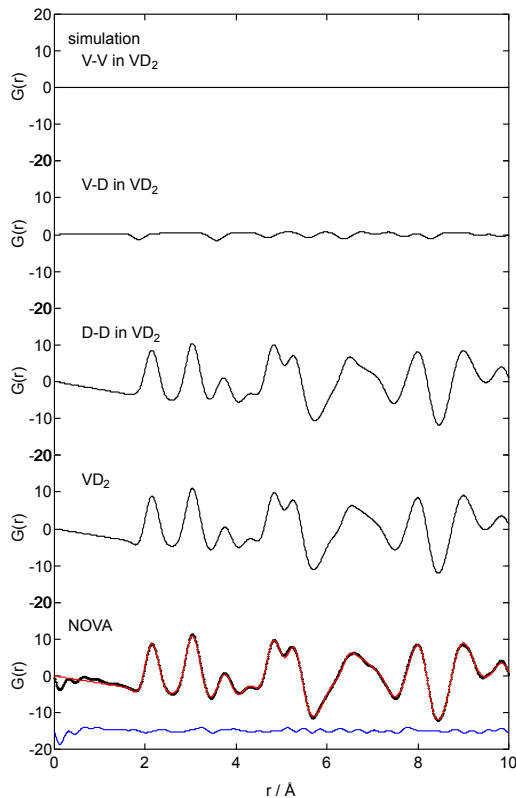
(再委託：京都大学原子炉実験所)

2 体分布関数から配位数を計算するプログラムを整備した。時間変化を伴う構造について、任意の時間のデータを取り出し解析可能となった。

2.5.5.2.2 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)

VD₂ は、水素が入り得るすべてのサイトに貯蔵されており、その構造はリートベルト解析により得られる平均構造とほぼ同じであるため、NOVA の水素化物の PDF 解析性能の検証に適している。図III.2.5-(43)に、PDF 解析を行った結果を示す。VD₂ は、金属グループより提供を受けた。図中一番下が VD₂ の結晶パラメータを実験データに最適化した結果である。最適化された結晶パラメータから、D-D、V-D、V-V 各相関を計算した $G(r)$ が図中に併記されている。このように、PDF 解析を行う事で、D-D 相関を表す $G(r)$ を導出することができた。これより、最も短い V-V 相関は、約 2.1 Å にピークを持つ事が分かる。このような PDF 解析の手法を様々な物質の固溶相や 2 相共存領域に適用することで水素-水素相関の導出し、原子レベルでの水素密度評価に展開できる。ちなみに、バナジウム (V) は、原子間の相関に起因する中性子解析をほとんど生じないという特性を有しており、V-V 相関の $G(r)$ はほぼゼロとなっている。



図III.2.5.-(43) リートベルト解析データに基づいて行った VD_2 の PDF 解析結果

2.5.5.2.3 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)

2.5.3.3.3 に述べたように非晶質水素化物の構造解析も可能とした。また PDFgui[10]を組み合わせて使用することで、非晶質化過程の PDF 解析が可能になった。

2.5.5.2.4 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)

2.5.3.3.2 に述べた方法により、装置分解能による $G(r)$ の減衰パラメータを求め、さまざまなナノ構造体の数値解析式[17]を用いて、構造パラメータを決定することとした。

2.5.5.2.5 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：日本原子力研究開発機構)

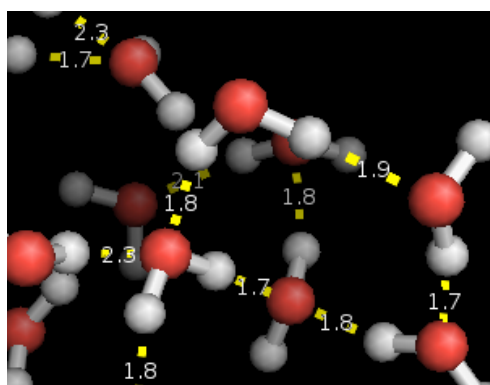
2.5.3.3.8 に示した $Ag_x(GeSe_3)_{1-x}$ 超イオン伝導ガラスの $S(Q)$ 導出までに時間を要したため、構造シミュレーションまで至らなかった。しかし、2.5.2.6 および 2.5.3.3.9 に示すように、リバースモンテカルロ法のための整備は完了している。

2.5.5.2.6 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）

構造の可視化のためにリバースモンテカルロ法（RMC）を改良し、これまでの欠点であった、共有結合をもった物質に対して非現実的な原子配置の生成を防ぐ方法を考案した。これは、錯体系水素化物が融解を伴いながら水素放出をする場合の構造解析に適用できると考えられる。

プロパノールの水溶液をモデル物質とした。三沢ら[18]により粗視化したRMC法により3次元モデルが作成されているが、分子配向などの局所的構造は不明であった。NOVAでは、水とアルコール分子の相互配向を明らかにすることで、水素原子のミクروسケールでの揺らぎ解析を行った。これは、水溶液中での疎水性水和の解明にも重要である。このため、モンテカルロ法において分子の遠距離への移動を可能にする準格子モデルにより組成揺らぎの生成と分子間配向の解析を可能にする方法を開発した。図III.2.5.-(44)には水についてシミュレーションを行い求めた分子配向のスナップショットを示した。



図III.2.5.-(44) 水分子の配向のシミュレーション結果

2.5.5.2.7 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）

水溶液中の生体分子のような多原子分子系では、構造情報を与える部分構造因子は多種にわたり、同位体置換した試料の中性子回折実験でも3次元構造を一義的に決定することは難しい。一方、計算機シミュレーションは3次元の液体構造を与えるが、用いる原子間ポテンシャルに敏感であるため、実験結果をよく再現する原子間ポテンシャルが望まれる。Empirical Potential Structure Refinement (EPSR) [19]モデリング法は英国ラザフォードアップルトン研究所(RAL)ISIS施設の不規則系物質研究グループが開発し、ソフトウェアを配布しているものであり、X線・中性子回折実験から得られた構造因子を用いて原子間ポテンシャルに修正を加え、より現実系に近いポテンシャルで計算機実験を行う方法である。この解析手法を水素結合系超臨界流体や水素原子を多量に含む生体関連分子の溶媒和構造を含む系に適用し、液体構造の3次元的可視化ならびに分子集合体（クラスター）解析が可能である。これらの結果は液体構造の直観的かつ本質的理解の手助けとなる。そのため、水

素結合系超臨界流体などの機能を有する液体について、構造と機能の関連を明らかにすることができる。

THF-水混合溶液の測定値を用いて EPSR 法による構造モデリングを行い、各原子対の 2 体分布関数、配位数、空間分布関数を求めた。図 III.2.5.-(45) にスナップショットを示したが、THF 分子同士の会合が見られ、濃度ゆらぎが生じていることが分かった。図 III.2.5.-(46) には、THF 分子の周囲の水分子の空間分布を表わした。水分子は主に THF 分子の酸素原子に配位していることがわかった。これらの結果ならびに 2 体分布関数、配位数についても、RAL の ISIS 施設で実施された純 THF 液体、23mol% THF-水混合溶液の構造解析の結果から判断して矛盾がなかった。つまり、NOVA による水素系物質測定データに対して、EPSR 法が適用可能であることが確認された。

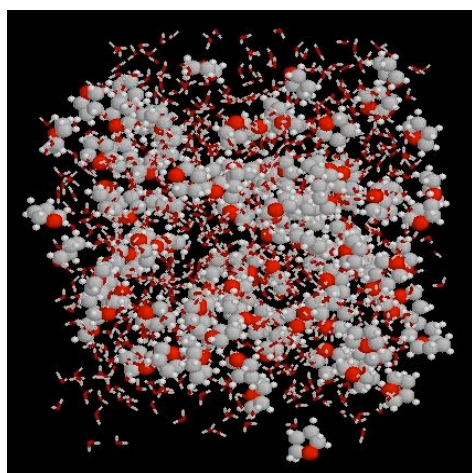


図 III.2.5.-(45) テトラヒドロフラン (THF) -水混合溶液のスナップショット図：水分子は wireframe モデル、THF 分子は CPK モデルで表わした。

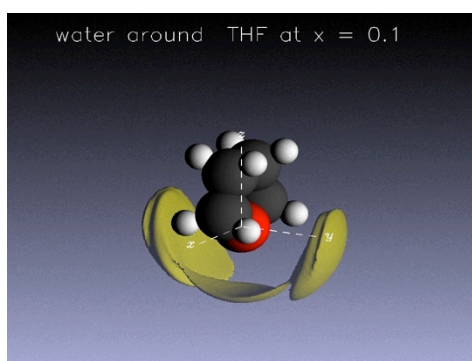


図 III.2.5.-(46) THF 分子周囲の水分子の空間配置

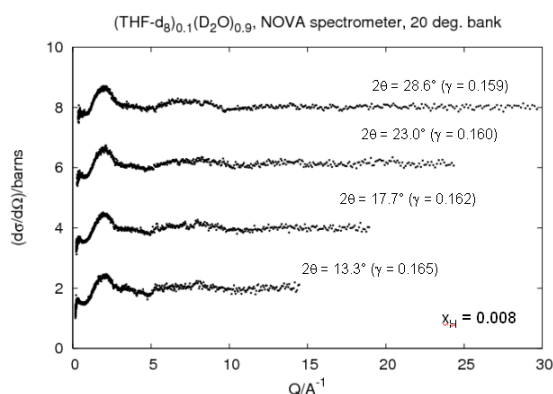
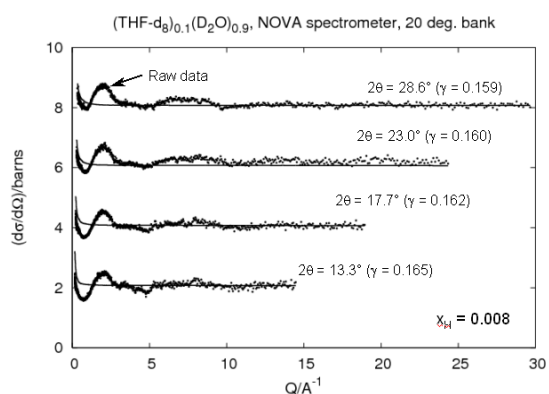
2.5.5.2.8 同位体置換を用いた精密構造解析法の水素系物質への適用

(再委託：山形大学)

H/D 同位体置換試料から得られた散乱データを組み合わせる事により、水素原子周囲の構造情報を抽出する「H/D 同位体置換法」を適用するために必要なデータ解析方法の確立を目標とした。水素を多量に含む試料溶液に対する非弾性散乱補正の具体的方法としては、

これまでに多くの研究結果が報告されているが、どのような試料の構造解析に対しても有効な非弾性散乱補正の方法は未だに確立されているとはいえない。NOVA に対する非弾性散乱補正を実施するには、NOVA 用のデータ解析プログラムを新たに開発し、さらに非弾性散乱補正用ルーチンを組み込む必要がある。実測の $^0\text{H}_2\text{O}$ 液体($\text{H}_2\text{O}:\text{D}_2\text{O} = 64:36$, 水素の平均散乱長を 0 とした試料)の散乱強度を用いる方法[11]を H/D 同位体分率が異なる 10mol% テトラヒドロフラン水溶液に適用し、同方法による非弾性散乱補正の有効性を確かめた。

$2\theta = 20^\circ$ の検出器バンクにより観測された 10mol%重水素化テトラヒドロフラン ($\text{THF-}d_8$)重水溶液の散乱断面積を図III.2.5.-(47)に示す。観測された散乱断面積の低 Q 側には非弾性散乱効果に由来する散乱強度の増加が見られる。さらに、この増加の程度は散乱角の大きさに依存している。試料に含まれる H 原子の数を合わせた $^0\text{H}_2\text{O}$ の散乱断面積は、この低 Q 領域の散乱強度の増加を良く再現している。非弾性散乱補正を施した $\text{THF-}d_8$ 重水溶液の散乱断面積を図III.2.5.-(48)に示す。各散乱角のデータは互いに良く一致しており、非弾性散乱補正が良好に実行された。



図III.2.5.-(47) $(\text{THF-}d_8)_{0.1}(\text{D}_2\text{O})_{0.9}$ について 観測された散乱断面積(点)。非弾性散乱補正項
図III.2.5.-(48) 非弾性散乱補正を施した $(\text{THF-}d_8)_{0.1}(\text{D}_2\text{O})_{0.9}$ の散乱断面積(点)。
を実線で示す。

同様の非弾性散乱補正を、H 原子の割合が多い 10mol%天然同位体比テトラヒドロフラン ($\text{THF-}h_8$)重水溶液に対して適用した結果を図III.2.5.-(49)および図III.2.5.-(50)に示す。 $\text{THF-}d_8$ 重水溶液に比較して、非弾性散乱効果による低 Q 領域における散乱強度の増加がより大きくなっている。さらに、この傾向は散乱角が大きくなるに従って、より顕著になっていることが分かる。補正後の散乱断面積は異なる散乱角のデータの間で良く一致しており、 $^0\text{H}_2\text{O}$ の散乱強度を用いた非弾性散乱補正が有効に働いている事が実証された。

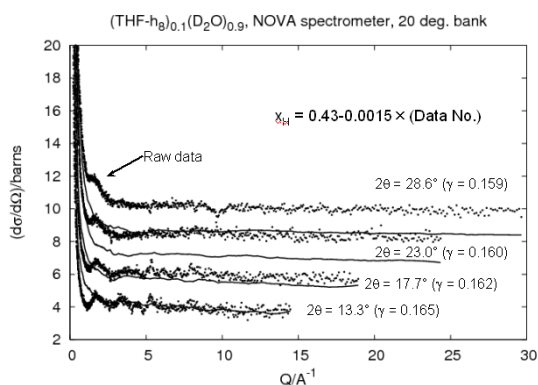


図 III.2.5.-(49) (THF- h_8) $_{0.1}$ (D $_2$ O) $_{0.9}$ について観測された散乱断面積(点)。非弾性散乱補正項を実線で示す。

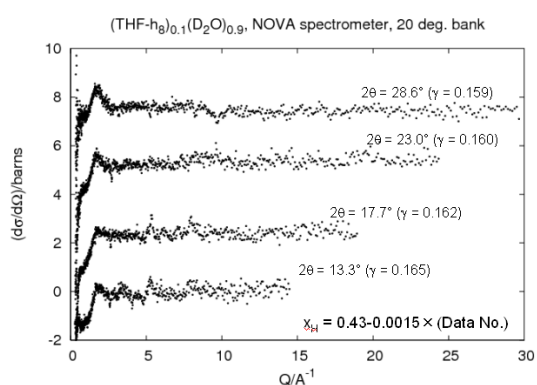


図 III.2.5.-(50) 非弾性散乱補正を施した (THF- h_8) $_{0.1}$ (D $_2$ O) $_{0.9}$ の散乱断面積(点)。

非弾性散乱補正を行った後、 20° 検出器バンクのデータを合計して干渉項を求め、干渉項の Fourier 変換より、動径分布関を求めた (図 III.2.5.-(51)、図 III.2.5.-(52))。Fourier 変換の際に用いた Q の上限は 30 \AA^{-1} である。

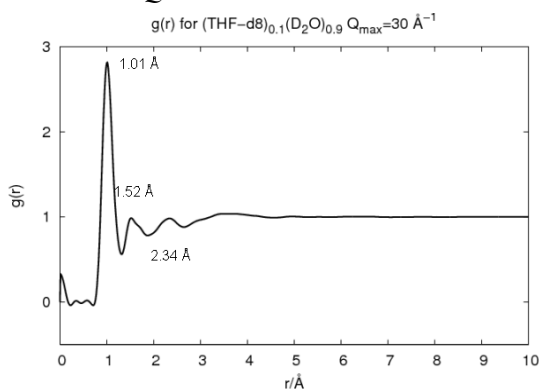


図 III.2.5.-(51) (THF- d_8) $_{0.1}$ (D $_2$ O) $_{0.9}$ について観測された 2 体分布関数 $g(r)$ 。

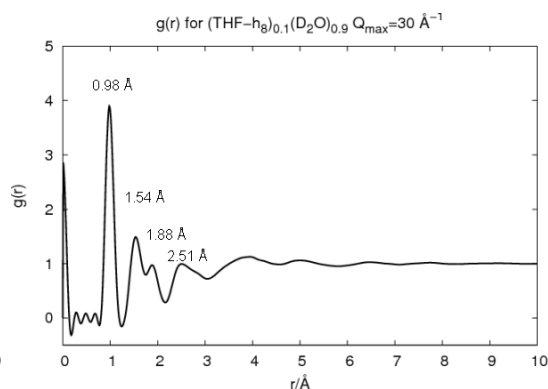


図 III.2.5.-(52) (THF- h_8) $_{0.1}$ (D $_2$ O) $_{0.9}$ について観測された 2 体分布関数 $g(r)$ 。

(THF- d_8) $_{0.1}$ (D $_2$ O) $_{0.9}$ および(THF- h_8) $_{0.1}$ (D $_2$ O) $_{0.9}$ について観測された $g(r)$ には、THF 分子内の水素原子の散乱長の違いによる差が明瞭に観測された。

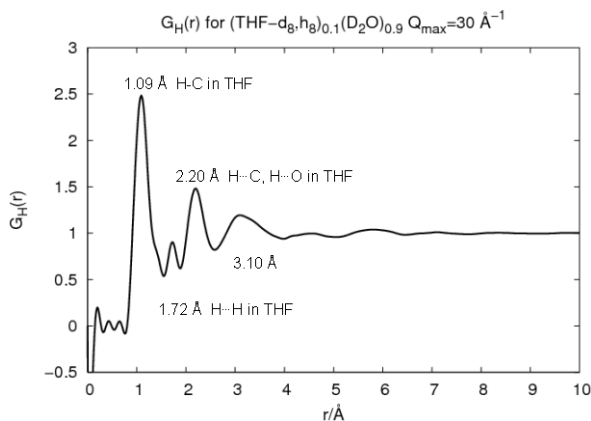


図 III.2.5.-(53) THF 分子内水素原子周囲の原子分布を表す分布関数 $G_H(r)$ 。

(THF- d_8)_{0.1}(D₂O)_{0.9} および(THF- h_8)_{0.1}(D₂O)_{0.9} について観測された干渉項の差 $\Delta_H(Q)$ の Fourier 変換より、THF 分子内の水素原子周囲の原子分布を表す分布関数 $G_H(r)$ を求めた (図 III.2.5.-(53))。 $G_H(r)$ の $r = 1.09$ および 1.72 \AA に見られる第 1 および第 2 ピークは、THF 分子内 H-C 相関および H \cdots H 相関に各々帰属される。 $G_H(r)$ の $r = 2.20 \text{ \AA}$ に見られるピークは、THF 分子内 H \cdots C および H \cdots O 相関によるものである。

$^0\text{H}_2\text{O}$ の散乱強度を用いた非弾性散乱補正により、H 原子を多量に含む試料のデータ解析を良好に行う事ができる事が示された。

2.5.6 水素貯蔵材料の構造研究

(高エネルギー加速器研究機構)

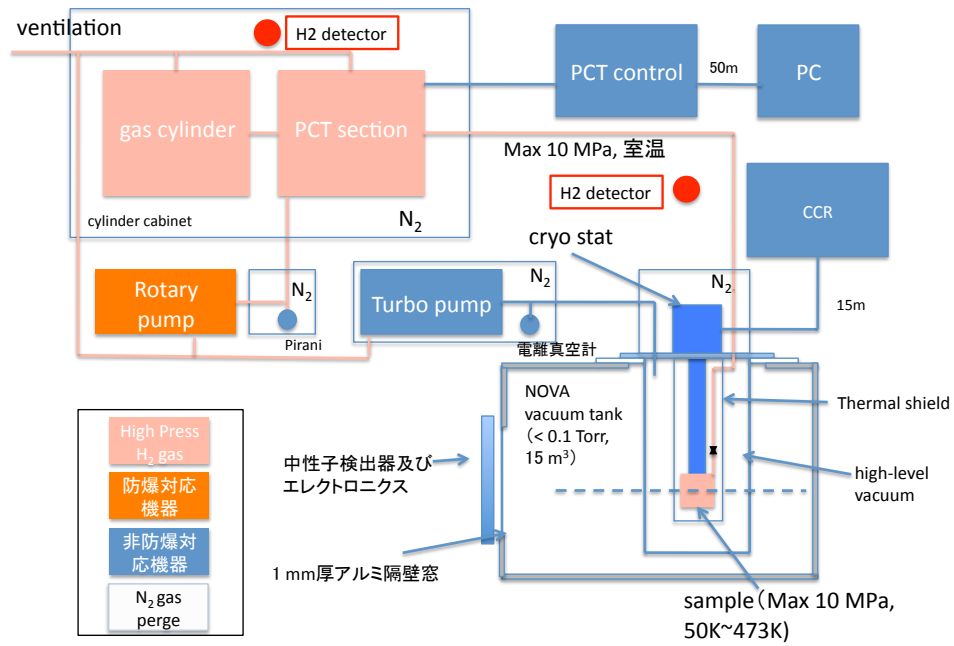
水素貯蔵材料の構造研究のために整備した NOVA での試料環境制御機器は表のとおりである。

機器名	性能	備考
水素ガス雰囲気下 in-situ 実験装置	最大 10 MPa 温度制御範囲：50 K ~ 473 K	
高温実験装置	温度制御範囲：室温 ~ 1373 K	
高压実験装置	最高圧力: 17 GPa 室温のみ	HydroStar 物性グループ 製作
室温実験装置	10 個の試料の自動測定可能	
非弾性散乱実験	エネルギー分解能は 10 ~ 20%	他の試料環境制御と併用が可能だが、測定時間は 10 倍以上必要

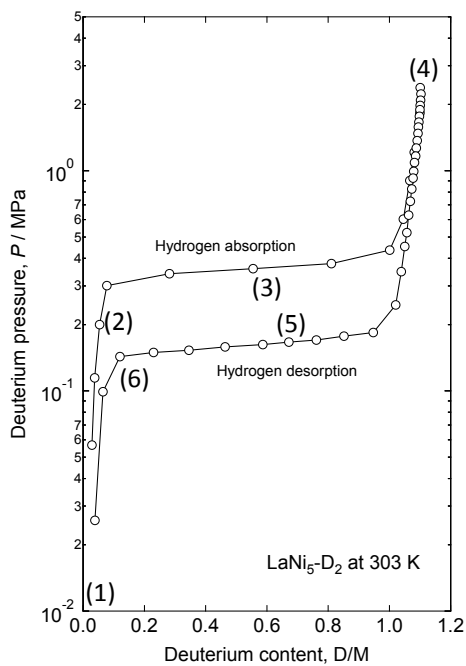
水素ガス雰囲気下 in-situ 実験

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、最大水素ガス圧力 10 MPa、測定温度範囲 50 K ~ 473 K の制御を可能とする水素ガス雰囲気下 in-situ 実験装置(以後 PCT 装置、図 III.2.5.-(54)) の仕様検討を京都大学とともに行った。製作は平成 21 年度に実施し、平成 22 年度に据付け・調整を行った。耐圧力、視認性、中性子回折バックグラウンド処理などについて優れるサファイア高压容器を PCT 装置用に設計し、導入した。これにより、試料部ガス容積が減少して試料量が増加したため、PCT 装置の水素量測定精度を 200 倍向上できた。典型的な水素貯蔵材料である LaNi₅ を用いて検証を行った。室温において、水素吸蔵過程の重水素ガス圧力-組成-等温 (PCT) 曲線を測定しつつ (図 III.2.5.-(55))、いくつかの圧力条件を維持して中性子散乱測定を実施した (図 III.2.5.-(56))。重水素圧力の上昇に伴う回折ピークのシフトおよび新たな回折ピークの出現

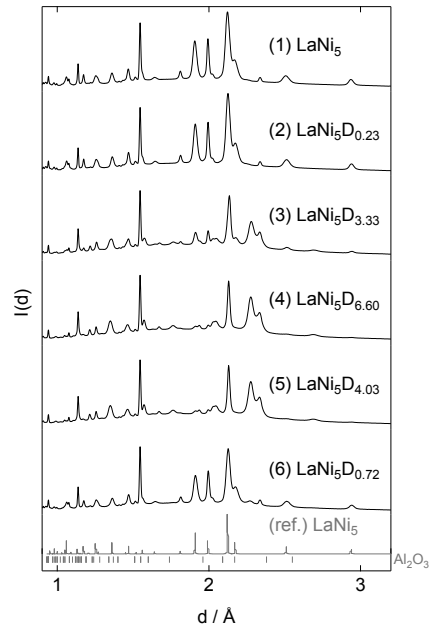
が観測でき、装置の性能を確認できた。これにより、水素貯蔵・放出過程を中性子回折により観測する準備が完了した。



図Ⅲ.2.5.- (54) NOVA 水素ガス雰囲気下 in-situ 実験装置の機器構成の概要

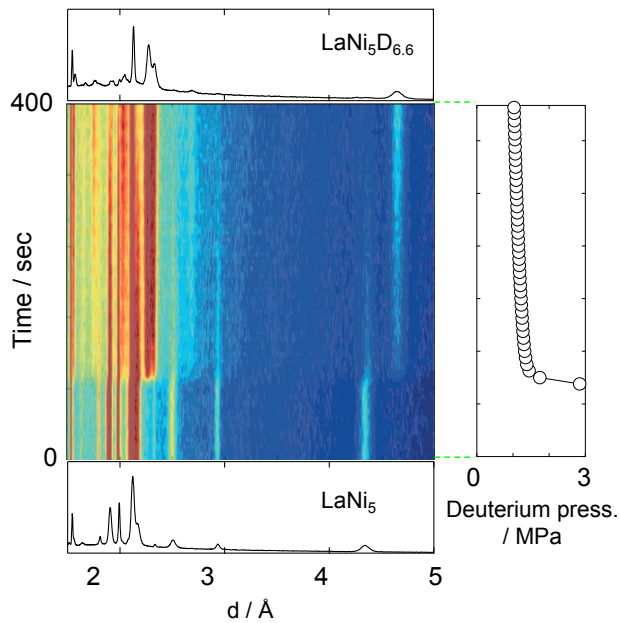


図Ⅲ.2.5.- (55) LaNi_5 の室温における重水素ガス圧力-組成-等温曲線



図III.2.5-(56) 重水素ガス雰囲気における LaNi_5 の中性子散乱パターン。(1)~(6)の条件は図III.2.5-(55)に示す。

また経時変化測定回路を利用し、水素ガスに試料を暴露した瞬間からの構造変化を観測することにも成功した(図III.2.5-(57))。



図III.2.5-(57) 重水素ガス雰囲気における LaNi_5 構造変化の時間分割観測

アルミニウム水素化物

高密度水素貯蔵材料として期待されている AlH_3 の脱水素化過程を解明するための構造の情報を得ることを目的とし、 AlD_3 (AlH_3) を LiAlD_4 (LiAlH_4) と AlCl_3 を用いた液相反

応により合成して、高強度中性子回折を NOVA において行った[20]。リートベルト 解析により、これまでに報告されている α -AlD₃ (AlH₃) と同様の結晶構造パラメータを確認できた (図 III.2.5.-(58))。さらに、SPring-8 で測定された高輝度 X 線回折曲線と合わせて解析することにより、TEM で観察されていた、AlD₃ (AlH₃) の脱水素化反応を抑制する数 mol% の表面層がアルミニウム酸化物 (γ -Al₂O₃) であることが示唆された。

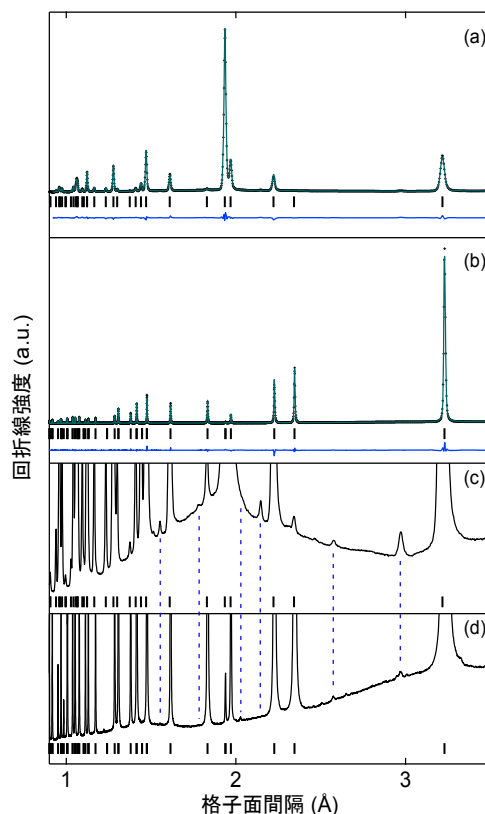
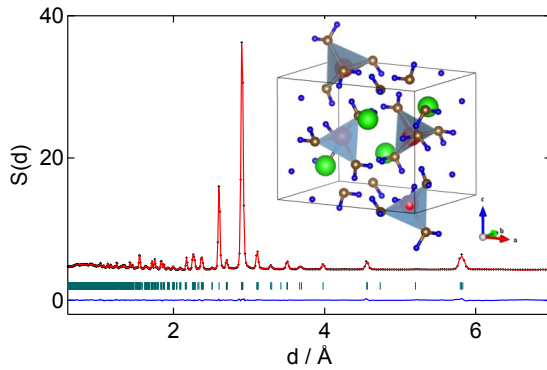


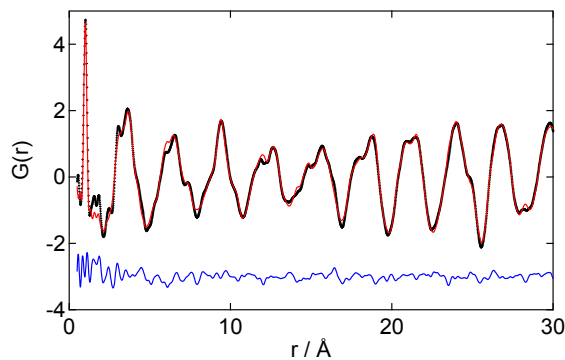
図 III.2.5.-(58) (a) α -AlD₃ の高強度中性子回折パターンと (b) α -AlH₃ の放射光 X 線回折パターン。(c), (d) は (a), (b) の縦軸を 70 倍拡大した回折パターンを示す。

リチウムアルミニウムアミド LiAl(ND₂)₄ (非金属系グループとの連携)

リチウムアルミニウムアミド LiAl(ND₂)₄ (以下、Li-Al-amide) の熱分解過程を解明するため、種々の熱処理試料について NOVA で中性子散乱測定を実施して局所構造を調べた。試料合成の制約により測定試料量は 50 mg 程度の非常に少量であったが、検出器バンク全体のデータを適切に足し合わせれば十分な統計精度の $S(Q)$ が得られることを実証できた。さらに、 $S(d)$ および $G(r)$ をそれぞれリートベルトおよび PDF 解析することにより平均・局所構造の精密化を行うことにより (図 III.2.5.-(59)、図 III.2.5.-(60))、NOVA の高い S/N と中性子散乱測定の特長を活かして水素の原子位置および変位をより詳細に決定できることを確認した。



図III.2.5-(59) LiAl(ND₂)₄のNOVAによる中性子散乱パターン $S(d)$ のRietveld解析結果。



図III.2.5-(60) LiAl(ND₂)₄のNOVAによる中性子散乱パターン $G(r)$ のPDF解析結果。

高圧下でのLaD₂相分離の観察（物性グループとの連携）

高圧下の希土類水素化物La(H/D)₂の高圧構造変化を観測した。物性グループにより、希土類2水素化物全般で、高圧下において金属格子中を水素が移動し、水素密度が異なる2つの状態に自発的に相分離するという興味深い発見がなされている[21]。高圧下における金属格子間の水素の状態を直接観測するために、高圧装置をJ-PARC高強度全散乱装置(NOVA)に導入し、国内最高圧力となる17 GPaでの高圧中性子実験データの取得に成功した。その結果、LaD₂が、岩塩構造を持つLaDと面心立方構造をもつLaD₃に相分離することをX線回折データと合わせた解析により、初めて明らかにすることができた[22]。高圧実験では、圧力を高めるために試料容積は小さくする必要があり(17 GPaでは15 mm³)、高圧装置により生じるバックグラウンドの低減措置とNOVAでの大強度中性子線(200 kW)により成功に至ったものである。

MgCa₂Ni₉重水素化物（金属系グループとの連携）

水素化物の中性子回折データを解析し、水素占有位置と占有率について解析を試みた。MgCa₂Ni₉重水素化物(以下、水素化物と表記)を失活化し、NOVAを用いてex situ測定によ

り中性子回折を測定した。主な水素占有サイトは、 MgCaNi_4 セル内の A2B2 サイトと CaNi_5 セル内の AB3 サイトであった。同じ結晶構造をとることが報告されている LaY_2Ni_9 水素化物のサイトと比較すると、上記サイトの占有は両水素化物に共通だが、 MgCa_2Ni_9 水素化物の方がこれらのサイトの水素の占有数が多かった。逆に AB5 セル内の別の AB3 サイトは LaY_2Ni_9 水素化物では多く占有されているが、 MgCa_2Ni_9 水素化物では占有が非常に少ないことがわかった。このことから、Mg、Ca を構成元素として含む場合の特徴として、A2B4 セル内の A2B2 および AB3 サイトへの水素占有数が多くなることが挙げられ、そのため、水素化物の安定性や平衡水素化特性は A2B4 セル内の水素占有に大きく依存するものと考えられる。

$\text{V}_{20}\text{Ti}_{25}\text{Cr}_{50}\text{Mo}_5$ 合金 (金属系グループとの連携)

中性子を用いた水素化物の構造解析の場合、H の代わりに D(重水素)を使うのが常道であるが、V-水素系では同位体効果が知られていることから、実際に貯蔵に用いる H を用いて解析を試みることにした。H を用いると非干渉性散乱がとて大きくするために解析が難しくなるが、リートベルト法で水素位置と占有率を解析した。概ね妥当な結果が得られた。水素放出後の試料については、水素濃度が小さいために解析の不確定性が大きく、さらに検討が必要とわかった。

2.5.7 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 ロシアラモス国立研究所)

米国ロシアラモス国立研究所の中性子全散乱装置 NPDF との性能評価を行うため、共通試料の測定を行い、2.3.4.1 に示した解析を行った。また、平成 22 年 2 月 22 日及び 23 日に、ロシアラモス国立研究所の Thomas Proffen 博士とともにワークショップを開催し、PDF 解析の性能比較を行った。

シリコン粉末やニッケル粉末の構造解析の結果、NOVA の性能が優れていることがわかった (2.5.3.3.1)。

【目標の達成状況】

※) 達成度：「◎：大幅達成、○：達成、△：一部未達、×：未達」

項目	目標と実施内容	成果	達成度 ^{※)}
2.5.1 中性子検出器システムの開発・製作	高強度全散乱装置 (NOVA) のための中性子検出器システムの開発と稼働。水素ガス雰囲気下実験において、数秒程度の経時変化測定を実現。	所期の性能を有する検出器システムを稼働させた。水素ガス雰囲気下で秒単位の経時構造変化を観測した	○

2.5.2 中性子ビーム制御デバイスの研究開発	バックグラウンド低減のためのデバイスの開発と稼働。非弾性散乱実験のためのデバイスの開発と稼働。	所期の性能を満たすデバイスを開発し、定常稼働している。非弾性散乱実験デバイスを製作し、水素貯蔵・放出過程における水素の結合状態について情報を得ることが可能となった。全散乱装置としては世界初。	◎
2.5.3 全散乱装置の研究開発	結晶、液体、アモルファス、水素貯蔵物質、超イオン伝導物質、水素含有物質など、多様物質の構造解析による性能検証。	装置分解能、測定 d 領域 (Q 領域)、測定強度といった基本性能は、世界トップレベルであることが検証の結果、明らかになった。	◎
2.5.4 放射線安全設備の建設	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等の設備の建設。	J-PARC の安全基準に従い、適切な設備を計画通り建設した。	○
2.5.5 装置制御・データ解析ソフトウェアの研究開発	水素貯蔵材料の中性子全散乱法による測定と構造研究に必要な計算機システムとソフトウェアの整備。	数十ギガバイトから数百ギガバイトに及ぶデータ集積、データ補正、データ解析が行える計算環境を整備した。	○
2.5.6 水素貯蔵材料の構造研究	水素貯蔵材料研究用実験設備の開発と水素貯蔵材料研究	水素ガス雰囲気下でのその場測定装置の完成、アルミ水素化物の構造解析、リチウムアルミニウムアミドの構造解析、高圧下での岩塩構造を有する LaD 相生成の観測、 $MgCa_2Ni_9$ 重水素化物、 $V_{20}Ti_{25}Cr_{50}Mo_5$ 合	◎

		金、ゼオライト鋳型炭素の構造解析を実施した。	
2.5.7 水素貯蔵材料のPDF解析	水素化物についてNOVAで概要測定し、米国ロスアラモス国立研究所の中性子全散乱装置NPDFで精密解析を行う。	標準試料によるNOVAとNPDFとの比較の結果、NOVAの性能が優れており、NOVAにおいて精密解析が可能であることがわかった。	○

【参考文献】

1. Egami, T. and S.L.J. Billinge, *Underneath the Bragg Peaks - Structural Analysis of Complex Materials*, 2003: Pergamon.
2. Satoh, S., et al., *Development of a readout system employing high-speed network for J-PARC*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2009. **600**(1): p. 103-106.
3. Sauli, F., *GEM: A new concept for electron amplification in gas detectors*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 1997. **386**(2-3): p. 531-534.
4. Ohshita, H., et al., *Development of a neutron detector with a GEM*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2010. **623**: p. 126-128.
5. Ohshita, H., et al., *Stability of neutron beam monitor for High Intensity Total Diffractometer at J-PARC*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2012. **672**: p. 75-81.
6. Itoh, S., K. Ueno, and T. Yokoo, *Fermi chopper developed at KEK*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2012. **661**(1): p. 58-63.
7. Itoh, S., et al., *T0 chopper developed at KEK*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2012. **661**(1): p. 86-92.
8. Oishi, R., et al., *Rietveld analysis software for J-PARC*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A, 2009. **600**: p. 94-96.
9. Oishi-Tomiyasu, R., et al., *Application of matrix decomposition algorithms for singular matrices to the Pawley method in Z-Rietveld*. Journal of Applied Crystallography, 2012. **45**: p. 299-308.
10. Farrow, C.L. and et al., *PDFfit2 and PDFgui: computer programs for studying nanostructure in crystals*. Journal of Physics: Condensed Matter, 2007. **19**(33): p. 335219.
11. Kameda, Y., et al., *Inelasticity Effect on Neutron Scattering Intensities of the Null-H₂O*. Journal of

- Neutron Research, 2003. **11**(3): p. 153 - 163.
12. McGreevy, R.L. and L. Pusztai, *Reverse Monte Carlo Simulation: A New Technique for the Determination of Disordered Structures*. Molecular Simulation, 1988. **1**(6): p. 359 - 367.
 13. Nakayoshi, K., et al., *DAQ-Middleware for MLF/J-PARC*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2010. **623**: p. 537-539.
 14. Nakatani, T., et al., *Prototype of network distributed control system for MLF/J-PARC*. Physica B: Condensed Matter, 2006. **385-386**: p. 1327-1329.
 15. Suzuki, J., et al., *Object-oriented data analysis framework for neutron scattering experiments*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2009. **600**(1): p. 123-125.
 16. Blech, I.A. and B.L. Averbach, *Multiple Scattering of Neutrons in Vanadium and Copper*. Physical Review, 1965. **137**(4A): p. A1113.
 17. Kodama, K., et al., *Finite size effects of nanoparticles on the atomic pair distribution functions*. Acta Crystallographica Section A, 2006. **62**(6): p. 444-453.
 18. Misawa, M., et al., *A visualized analysis of small-angle neutron scattering intensity: concentration fluctuation in alcohol-water mixtures*. Journal of Applied Crystallography, 2007. **40**(s1): p. s93-s96.
 19. Soper, A.K., *Partial structure factors from disordered materials diffraction data: An approach using empirical potential structure refinement*. Physical Review B, 2005. **72**: p. 104204.
 20. Ikeda, K., et al., *Structural and Hydrogen Desorption Properties of Aluminum Hydride*. Materials Transactions, 2011. **52**: p. 598-601.
 21. Machida, A., et al., *Phase separation of lanthanum hydride under high pressure*. Physical Review B, 2011. **83**(5): p. 054103.
 22. Machida, A., et al., *Formation of NaCl-type monodeuteride LaD by the disproportionation reaction of LaD₂*. Physical Review Letters, 2012.

【成果の意義】

NOVA は、中性子による回折実験として世界で最も短い時間での測定が可能な装置となっており（高強度）、新規に開発された物質で作製量が少ない場合でも測定が可能であること（高い信号/ノイズ比）、結晶、非晶質、液体等さまざまな構造の解析が可能であること（高汎用性）を実現した世界最高水準の装置であり、産業界からの多様なニーズに応えられる装置となった。今後、NOVA による構造解析が産業界による水素貯蔵材料開発を加速することが期待される。すでに、一般公募により採択された産業界からの実験テーマ 2 件を実施済みで、データ解析を終了した。NOVA の優れた性能を生かすことで、これまで中性子実験では困難と思われていたような実験、例えば反応過程の観測や表面・界面の構造解析等を実施できる可能性を有している。水素貯蔵材料のみならず、触媒や磁性材料等の様々な材料研究や物質科学に貢献できるものと期待される。中性子検出器システム、真空槽、生体遮蔽体、水素貯蔵材料計測用機器等、ほとんどの機器は NOVA のために設計・開発されたものであり、同程

度規模の中性子実験装置と比較しても、コストは相応であると考えている。

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礎基盤的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推進された。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水素貯蔵材料の構造・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・計算科学的基盤を整えた。平成 22 年度から平成 23 年度は開発した計測評価技術および計算科学的手法を活用して各種材料の結晶構造、局所構造、欠陥構造等の解析、及び材料中の水素存在位置、存在状態の解析等を行い水素貯蔵等に係る基本原理を解明し、産業界に対して水素貯蔵材料の高性能化への開発指針を提供するとともに、その成果の活用および普及を目的として産業界等との連携を図ってきた。

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、当該研究の推進に必要な実験・解析結果を提供した。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、システム技術開発の加速を図った。また、同並行事業の次世代技術開発プロジェクトである、「ゼオライト鑄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、研究開発の推進を図るとともに、平成 22 年度以降は本事業内で研究を実施した。このように、NEDO の関連事業間における連携を着実に進めることで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を図ってきた。今後、本事業で得られた開発指針や計測評価技術を産業界が活用することで、高性能な水素貯蔵材料開発の更なる加速が期待される。

金属系グループでは、本事業で行った構造解析の結果から、より水素吸蔵量の多い材料の探索対象として Mg, Ca などの軽金属元素を含む AB₂系ラーベス相合金および積層型合金が有望であること、また、金属間化合物および BCC 型合金の繰り返し特性向上のためには金属格子における欠陥の生成・蓄積を抑制する方策が有効であることを提案した。本提案を基に開発された金属系水素貯蔵材料は、燃料電池自動車用の水素タンクとして用いられると期待さ

れる。走行時は燃料電池の廃熱の供給により速やかに水素を放出し、燃料補給時は水素ステーションにおいて水素ガスを速やかに充填できる。圧縮ガスタンクに比べて、体積の低減、充填圧力の低下、充填時の冷却作業の簡素化等が実現できる。

開発のマイルストーンおよび引き続き研究開発が行われる見通しについては、平成24年度に調査研究が行われ、その後の開発のロードマップが検討される予定である。

非金属系グループでは、種々の非金属系水素貯蔵材料を解析した結果、水素貯蔵材料として、アンモニアボラン (NH_3BH_3 : 水素量 20mass%) と水素化アルミニウム (AlH_3 : 水素量 10mass%) が 2030 年の NEDO の目標値 (システムとして 7.5mass% 以上) を満足できる有力候補として提案した。米国エネルギー省においても、多くの水素貯蔵材料の中からアンモニアボランを選択して実際にタンクに詰めて性能試験を行うこととしている。これらの物質の水素吸蔵・放出速度 (動力学特性)、反応温度 (熱力学的安定性) は実用的な水素貯蔵材料として現状では必ずしも十分ではなく、水素吸蔵・放出速度 (動力学特性) の改良と反応温度 (熱力学的安定性) の改良を本事業で進めて来た。今後も、本事業で提案しているナノ構造化の更なる高度化で改良を進めることが期待される。開発のマイルストーンおよび引き続き研究開発が行われる見通しについては、平成24年度に調査研究が行われ、その後の開発のロードマップが検討される予定である。

放射光利用に関しては、水素吸蔵または放出過程に関して、構造や電子状態変化のその場観察手法の確立とその有効性の実証を進めた。SPring-8 の原子力機構ビームラインに構築したその場観察システムは、平成24年度より原子力機構の施設供用課題制度による利用申請を行うことで産業界をはじめとする他の研究機関でも課題審査を経て利用することが可能となり、水素貯蔵材料の高性能化へ資する実用化が始まっている。また、アルミニウム水素化物 AlH_3 は水素貯蔵能の点から水素貯蔵材料の有力な候補であるが、熱力学的安定性の点で実用材料としては不十分である。放射光を利用した反応過程のその場観察や電子構造研究からアルミニウムをベースにした水素貯蔵材料開発の方針を得るための研究を実施してきたが、その一つとして AlH_3 とは異なる結合様式を持つ材料の探索を実施し、 Al_3Ti 合金で高温高圧下ではあるが水素固溶体を実現した。これは新規アルミニウム系水素貯蔵合金の開発に一つの方向性を示した結果であり、今後もより高性能な材料の探索が期待される。

計算科学的手法の水素貯蔵材料への適用に関して、実験グループの成果や文献値との詳細な比較により、我々が用いた手法・計算モデルが現実系と良く対応していることが確認できた。その意味で計算科学は、理論を基礎とした水素貯蔵材料の解析評価技術として実用化の域に達していると言えよう。

本事業での解析対象とした水素貯蔵材料の中では、特に ZTC による物理吸着+スピルオーバー貯蔵方式が、燃料電池自動車への搭載に求められる特性 (水素の放出温度は 100°C 以下、十分な吸蔵・放出速度、高い繰り返し耐久性、低コスト) を満たす材料として期待される。

今後 10 年以内を視野に実用化を目指す方針である。その他の材料についてもそれぞれの利点を生かした開発を進めることにより実用化の可能性はある。

開発のマイルストーンおよび引き続き研究開発が行われる見通しについては、平成 24 年度に調査研究が行われ、その後の開発のロードマップが検討される予定である。

本事業で建設した中性子全散乱装置 NOVA は、世界トップレベルの中性子全散乱装置として大きな関心を持たれている。今後、NOVA を用いた水素貯蔵材料の研究が展開して行く見通しが立っている。

高強度中性子全散乱装置 (NOVA) を利用することで、水素貯蔵材料の水素に着目した構造解析が可能であることが実証されており、様々な材料の構造解析を展開していくことで、高性能水素貯蔵材料開発の指針が得られる可能性が高い。また、世界的にもユニークな装置であるので、引き続き、水素貯蔵材料の研究が発展していくのは間違いない。

水素貯蔵材料は、燃料電池自動車の大量生産期に必要な「水素貯蔵材料容器システム」の実現のために高性能化が必要とされる。本事業は高性能化を図るために必要な基本原理の解明に基づき、高性能水素貯蔵材料の開発指針を産業界へ提供する事を目的としている。また、それと同時に水素貯蔵材料の高度な解析評価技術の確立を図ることも目的としてきた。

ここに述べた本事業の成果に基づき、産業界を中心に学界との連携の基、実用化を目指した研究開発を進めることで、燃料電池自動車への搭載のための「水素貯蔵材料容器システム」が開発され、大量生産の時期には実際に燃料電池自動車へ採用されると期待される。

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。また、SPring-8 にて開発した装置群も同様に各種の材料の高度な解析評価に利用されることが見込まれる。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。

金属系グループにおいて開発された解析手法については、水素貯蔵材料関連研究だけでなく、幅広く各種の材料研究に活用できるため、波及効果が大きい。とくに、局所構造解析の手法は、これまで解析が困難だったナノ構造や非晶質材料内部の原子配列の解析ができるため、多くの機能材料に展開が可能である。また、開発されたその場観察手法は、水素を含む種々のガスと固体との反応の解析に応用できる。

材料研究の成果については、直接的には、水素貯蔵材料関連の研究者、企業の技術者へ新しい知見を提供するもので、次の材料開発・研究に活かされるものと考ええる。

本プロジェクトの実施により採用した博士研究員（ポスドク）・特任研究員・テクニカルスタッフは7名で、そのうち4名はプロジェクトに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となったことから、水素貯蔵材料の研究分野の人材の確保・育成につながったと考える。

代表的な国際的連携としては、米国ロスアラモス研との共同研究を実施し、その中で水素貯蔵材料を対象とした中性子全散乱測定の実験環境を構築することができた。今後、多くの関連研究者に本環境が活用されることを期待している。

非金属系グループから提案した高性能水素貯蔵材料であるアンモニアボラン（ NH_3BH_3 ：水素量 20mass%）と水素化アルミニウム（ AlH_3 ：水素量 10mass%）を用い、ナノ複合化の手法を用いた性能改良によりシステムとして7.5mass%以上を満足できる材料が開発される事が期待される。これにより、産業界において燃料電池自動車への搭載が検討されることになると予想される。

本事業で開発された様々なその場観察技術は、高性能二次電池開発者が電池反応を観察するためなどに極めて効果的に活用できる。

当プロジェクト実施により、国内外の博士研究員（国内7名、中国6名、インド1名、バングラディッシュ1名）を雇用した。また、大学院生（15名）を研究補助員として雇用した。その内の多くは水素貯蔵材料研究を継続しており、水素貯蔵材料分野の若手人材育成を促進した。

ロスアラモス国立研究所（米国）-広島大学ワークショップを二回開催して、国際的な交流を行った。その成果として、アンモニアボランから水素放出後に生成する BN が、化学的プロセスを経てアンモニアボランに再生することを見出し、世界的にも注目された。

SPring-8 の放射光利用研究の波及効果としては、高温高圧極限環境下における水素化反応その場観察を一例として挙げるができる。この計測手法は水素貯蔵材料研究以外にも適用され、高圧水素貯蔵用の複合容器技術基準で規定された A6061-T6 合金の高温、高圧下における水素化条件の決定が実施された。A6061-T6 合金試料は、NEDO の委託を受けた「水素社会構築共通基盤整備事業／水素インフラ等に係る規制再点検及び標準化のための研究開発／水

素用アルミ材料の基礎研究」実施グループを通じて提供されたものであり、産業界等との連携により極限環境下における高圧水素容器に使用されるライナー材の特性に関わる知見を提示した好例であると考えている。このように、開発した先端的解析設備は、水素安全等に係わる広い範囲で利用されると期待される。

本事業によって高度化された放射光利用によるその場観察技術等や先端的計測装置等によって、水素化物の新たな構造特性や電子状態等を明らかにすることに成功している。その例として希土類金属をモデルとした高濃度水素化物の実現やアルミニウム水素化物の結合状態の観測が挙げられる。特にアルミニウム水素化物の結合状態の知見は、新規アルミニウム系水素貯蔵材料の開発に一つの方向性を与える結果である。産業界等において開発される材料に対しても、本事業で開発した手法を用いることによって従来は得られない知見の取得が期待される。そのため、本研究開発項目で構築した研究開発基盤によって産業界等における材料開発の加速することができると期待される。

本事業で多数の若手研究員（11名）を専従研究員として雇用し、また委託先に属する博士研究員（7名）も広く事業に従事した。その多くが、事業終了後も水素貯蔵材料の研究開発あるいは開発した超先端的解析技術の更なる高度化に取り組んでおり、若手の人材育成には大きく貢献した。

計算科学により多種多様な条件下での水素貯蔵材料の特性変化が予測できる可能性が示された。これにより、実験研究者が知りたいと思いつながらデータ取得が困難だった極限環境下や未合成物質等に関する情報を提供するなど、さまざまな波及効果が期待できる。

計算科学は材料特性予測のみならず、材料中の水素の挙動を時系列として追跡する能力がある。これにより水素貯蔵に関する未知のメカニズムを解明するなどの波及効果も期待できる。本事業の遂行にあたり、大学・研究所職員以外に、水素貯蔵材料の計算科学的研究を展開し得る博士研究員24名を育成した。

高強度全散乱装置（NOVA）を利用することで、水素貯蔵材料の水素に着目した構造解析が可能であることが実証されており、今後、水素貯蔵材料に限らず、燃料電池材料、二次電池材料、太陽電池材料、超伝導材料、熱電材料のような様々なエネルギー材料あるいはその他の機能性材料の構造解析が展開していくことが期待される。

NOVA の建設にあたって、これまで中性子回折を行っていなかった人材を研究員として雇用し、NOVA での中性子散乱を利用して水素貯蔵材料研究を展開しうる人材を（2名）育成した。

NOVA での水素貯蔵材料研究はこれから本格化する段階であるため、成果の波及がどこまで広く及ぶかを想定するにまでは至っていないのが実情である。しかし、国内外の機関と連携して、今後成果が更に波及されていくことは間違い無い。

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、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。以下に 5 つの政策の柱毎に目的を示す。

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 - . 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 - . 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 - . 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 - . 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

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トランナー計画
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「製造プロセス向上」、民生・運輸部門における「省エネルギー」などにより、エネルギー消費効率を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) エネルギー使用合理化技術戦略的開発(運営費交付金)

概要

省エネルギー技術開発の実効性を高めるために、シーズ技術の発掘から実用化に至るまで、民間団体等から幅広く公募を行い、需要側の課題を克服し得る省エネルギー技術開発を戦略的に行う。

技術目標及び達成時期

中長期的視点に立った省エネルギー技術戦略を構築し、技術開発の相互連携によりシナジー効果が発揮され技術開発が促進されるよう、超燃焼システム技術、時空を超えたエネルギー利用技術、省エネ型情報生活空間創生技術、先進交通社会確立技術、次世代省エネデバイス技術の技術群に重点化して、省エネルギー技術戦略に沿った技術開発を戦略的に推進する。

研究開発時期

2003年度～2010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) 研究開発型中小企業挑戦支援事業(スタートアップ支援事業)

概要

省エネルギー対策に資する中小企業の優れた技術シーズ、ビジネスアイデアの事業化による創業・新事業展開を促進するため、実用化研究開発に要する経費(原材料費、直接人件費、機械装置費、知的財産取得費等)の一部を補助するとともに、補助事業を行う中小・ベンチャー企業等に対して中小企業基盤整備機構によるビジネスプランの具体化・実用化に向けたコンサルティング等を一体的に実施

する。

技術的目標及び達成時期

中小企業の技術開発を推進し、産業におけるエネルギー使用合理化技術の利用を図り、もって、中小企業の振興と経営の安定を促進する。

補助事業期間終了後2年後の採択企業の研究開発成果の事業化率50%を目標とするとともに、省エネルギー技術開発の高度化を戦略的に推進する。

研究開発期間

2004年度～

(4) 地域イノベーション創出エネルギー研究開発

概要

地域において新産業の創出に貢献し得るような最先端の技術シーズを基に、企業、公設試、大学等の研究開発資源を最適に組み合わせて形成された共同研究体が行うエネルギー使用の合理化並びに非化石エネルギーの開発及び利用に寄与する実用化研究開発の実施。

技術的目標及び達成時期

研究開発終了後3年後における成果の事業化達成率30%以上を目標とする。

研究開発期間

2008年度～2012年度

(5) イノベーション実用化補助事業(運営費交付金)(4 - - 参照)

(6) 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) 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。

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

(3) 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。

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

(4) 植物機能を活用した高度モノ作り基盤技術開発

i) 植物利用エネルギー使用合理化工業原料生産技術開発(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、現在の化学工業プロセスに代わる、植物の有する有用物質生産能を活用した省エネルギー・低環境負荷型の工業原料生産プロセスへの変換を促進する。具体的には、工業原料の生産に関わる重要な物質生産プロセスに関する代謝系をゲノム情報に基づき解析するとともに、有用物質生産制御に必要な一連の代謝遺伝子群の発現を統一的に制御する技術の開発を行う。

技術目標及び達成時期

2009年度までに、工業原料として有望なバイオマスとしてイソプレノイド、油脂などの有用物質生産に関わる代謝経路とその調節メカニズム及び生産物質の蓄積・移動に係るメカニズムの解析を行い、関連遺伝子情報を整備するとともに、統括的発現制御技術を開発する。

研究開発期間

2002年度～2009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体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。

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) 高機能チタン合金創製プロセス技術開発プロジェクト

概要

大量の電力を必要とする従来のバッチ処理方式のチタン製錬法(クロール法)を、エネルギー効率の高い連続処理方式へ転換する抜本的なプロセス改善のための技術を開発する。また、併せて、成形性の高いチタン合金設計技術及び成形プロセス技術を開発する。

技術目標及び達成時期

2008年度までに省エネ型チタン新製錬プロセスの基盤技術を開発し、2010年までに実用化を目指す。また、本製錬技術により得られるチタンをベースとして、加工性、強度等をさらに向上させた合金設計・成形プロセス技術を確立する。

研究開発期間

2005年度～2008年度

(7) 革新的分離膜技術の開発

概要

河川水等の浄水工程における、微量の有害物質、微生物等の除去に係る水処理技術のうち、分離膜方式による高効率(省エネ)な分離技術を開発する。

技術目標及び達成時期

2013年度末までに、現行の分離膜に比較して単位処理水量当たり50%のエネルギー削減を図る技術を確立する。

研究開発期間

2008年度～2012年度

(8) 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

(9) 省エネルギー型化学技術創成研究開発補助事業

概要

化学産業はそれ自身が裾野の広い産業というだけでなく、自動車、IT機器等の川下製品の部材として産業界・国民生活の様々な分野に深く関連している。従って化学業界において、省エネポテンシャルの大きい有望な技術シーズがありながら民間だけでは十分な研究開発投資が行われていない技術について、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、他産業においてエネルギー効率の改善を促進する。

技術的目標及び達成時期

2007年度までに、化学分野の生産プロセスや、製品等に関する環境に配慮した省エネルギー技術の革新に向けて、国内・国際市場の創出・拡大も見据えつつ、将来の発展が有望な技術に関する研究開発を行うことにより、化学産業のみならず、我が国の省エネルギー対策に一層寄与する。

研究開発期間

2004年度～2010年度

(10) 高効率酸化触媒を用いた環境調和型化学プロセス技術開発プロジェクト

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、N-オキシ系触媒等の炭素ラジカル創生触媒を化学反応プロセスに適用し、製造工程の短縮や製造効率の向上を図ることで、温暖化効果ガスの排出抑制や省エネルギー効果など総合的なプロセスコストを低減させるため要素技術の開発を行う。

技術的目標及び達成時期

2008年度までにカルボン酸、アルコール、ケトンなどの含酸素化合物製造プロセスに対し、N-オキシ系触媒を適用していくため、現状の触媒活性・選択性の向上、触媒の安定性・寿命の改善、触媒分離プロセスの効率化等を開発する。

研究開発期間

2005年度～2008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

2009年度までに、以下の開発を行う。

炭素繊維製造エネルギー低減技術の研究開発

廃棄衣料のリサイクル技術及び高付加価値商品の開発

排水処理における余剰汚泥の減容化技術開発

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

VOC含有廃棄物の溶剤回収及び再利用処理技術の開発

研究開発期間

2005年度～2009年度

(12) 無曝気・省エネルギー型次世代水資源循環技術の開発（運営費交付金）

概要

所用動力が少なく、汚泥発生も少ない嫌気性処理の利点と、良好な水質が得られる好気性処理の利点の双方の特長を生かし、かつ双方の欠点を克服した、省エネルギー性に優れた廃水処理技術を開発する。

技術目標及び達成時期

2008年度までに、既存技術で廃水処理を行った際に発生する汚泥量の70%削減を実現し、廃水処理に要するエネルギーの70%削減を実現する廃水処理システムを開発する。

研究開発期間

2006年度～2008年度

(13) 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

(14) エネルギー使用合理化高効率パルプ工程技術開発(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

- (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

従来の活性炭電極では不可能な高出力かつ高エネルギー密度の電気二重層キャパシタを実現するため、高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、これを用いたキャパシタ電極の開発を行う。

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) 固体酸化物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) 新利用形態燃料電池技術開発(運営費交付金)(4 - - 参照)
- (7) 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)
- (9) 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)
- (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) 風力発電電力系統安定化等技術開発(運営費交付金)(4 - - 参照)
- (12) 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)(4 - - 参照)
- (13) 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 - - . 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

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化の進展により、ネットワークを流れるデータ量が大幅に増加する中で、IT機器による消費電力量の大幅な増大に対応し、環境調和型IT社会の構築を図るため、個別のデバイスや機器に加え、ネットワーク全体での革新的な省エネルギー技術の開発を行う。

技術的目標及び達成時期

2012年度までに、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認する。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認する。

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、それをブレークスルーしう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認する。

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示す壁および窓材料を、セラミックスのナノ多孔体構造やナノ羽毛状構造およびセラミックス・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。

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

エネルギー需給構造の高度化を図る観点から、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効率よく製造する。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。

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認する。

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

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、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。

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) 高環境創造高効率住宅用VOCセンサ等技術開発(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、住宅における換気負荷を最小化することによって省エネルギーを達成するため、VOCセンサ及びモニタリング併用型換気システム等を開発する。

技術目標及び達成時期

2008年度までに、VOCに対して高選択性・高感度性・即応性を有するVOCセンサ及びVOCセンサを用いたモニタリング併用型換気システム等を開発する。

研究開発期間

2005年度～2008年度

(9) 革新的構造材料を用いた新構造システム建築物研究開発

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、我が国鉄鋼業の約50%を占める建設市場において、建築物のメインフレームに高強度鋼を用いることで、鉄鋼部材の軽量化(リデュース)とそれに伴う輸送効率の向上、高強度化、非溶接化に伴う部材のリユース促進、製造・施工の省エネ・省力化等を図る。

同時に、柔剛混合構造(高強度鋼とダンパーの組み合わせ)技術の確立、関連法規への対応等により、震度7にも耐えうる新構造システム建築物の建設が可能となり、我が国で大きなリスクである大規模地震災害から国民を守り、安心安全社会の実現に寄与する。

技術目標及び達成時期

2013年度までに、最大規模の地震(震度7)に対しても倒壊・損壊しない建築物を高強度鋼(800N/mm²級鋼材)とダンパーの組み合わせによる柔剛混合構造により実現を図るものであり、国土交通省や民間企業と連携してこの建築物のメインフレームに必要な高強度鋼部材、接合法等の開発を行う。主な研究開発目標は以下の通りである。

・震度7弾性新構造システム開発

- ・高強度部材の製造技術開発
- ・超高強度接合部品開発
- ・高強度部材の接合技術開発

研究開発期間

2006年度～2008年度

(10) 次世代光波制御材料・素子化技術（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、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。

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

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年度までにプローブ情報を利用した信号制御機能の実用化を図るとともに、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) 革新的次世代低公害車総合技術開発（運営費交付金）

概要

大気環境・地球温暖化・エネルギー問題の同時解決に向けて、次世代の低公害車の技術開発を実施する。

特に、都市間の輸送に用いられる「都市間トラック・バス」を中心とした分野における要素技術の開発を自動車技術・燃料技術の両面から実施していく。

技術目標及び達成時期

平成20年度において、都市間の輸送に用いられる「都市間バス・トラック」を中心とした分野における次世代低公害車の要素技術を確立する。具体的には、以下のとおり。

- ・燃費向上率

貨物車 現行基準値に対して10%

乗用車 2015年基準値に対して20%

・排出ガス

貨物車 NOx：ディーゼル重量車のポスト新長期（挑戦目標）規制値

PM：ディーゼル重量車のポスト新長期規制値

乗用車 NOx：ガソリン車のポスト新長期規制値

PM：ガソリン車のポスト新長期規制値

研究開発時期

2004年度～2008年度

(3) 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（CFRP）の開発を行う。

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、熱可塑性CFRP加工技術を開発する。

研究開発時期

2008年度～2012年度

(4) 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

(5) 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

(6) 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、耐雷対策の低コスト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、従来の方法に比べ低コストであり、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低コストで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

(7) 燃料電池システム等実証研究(4 - - 参照)

4 - - . 次世代省エネデバイス技術

(1) パワーエレクトロニクスインバータ基盤技術開発(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、省エネルギーを進めるために、シリコンよりも材料特性に優れたワイドギャップ半導体デバイスを用いた高効率インバータ等の実用パワーエレクトロニクス機器システムの基盤技術の開発を行う。

技術目標及び達成時期

2008年度までに、ワイドギャップ半導体デバイスを用いた高効率インバータ等の実用パワーエレクトロニクス技術を開発する。

研究開発期間

2006年度～2008年度

(2) 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日本が強みを有し、パワーデバイス、高周波デバイス、発光デバイス等、今後のIT社会を支えとなることを期待されている分野である。しかし、既存のバルク単結晶基板成長技術やエピタキシャル成長技術では、従来の半導体では実現できない領域で動作可能なハイパワー、超高効率デバイス性能を十分に引き出すには至っていない。

これを突破するため、大学あるいは研究所を拠点に材料メーカー、デバイスメーカー、装置メーカー等が相互連携して、窒化物半導体の結晶欠陥低減技術やナノ構造作製技術等の革新を図り、これらデバイスの飛躍的な性能向上と消費電力削減の実現を図る。

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。

- ・ 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。
- ・ 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

(3) 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、ブランクスの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

(4) 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、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、情報通信機器、特に、情報家電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

(5) 次世代高度部材開発評価基盤の開発 (CASMAT2) (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る。半導体産業分野で、集積回路の消費電力低減に必要な配線形成用各種材料等の開発のネックとなっているナノレベルでの材料間の相互影響を評価可能な統合部材開発支援ツールを開発する。これにより、集積回路の種類やデザインルールに応じて、配線形成用各種材料とプロセスの最適な組み合わせの提案技術(統合的材料ソリューション提案技術)を確立する。

技術的目標及び達成時期

2008年度までに、半導体材料開発に貢献する材料評価基盤を構築するとともに、上記の統合的材料ソリューション提案技術を確立する。また、本プロジェクトを通して得られた基礎データ等については、プロジェクト実施期間中にデータを体系的に整理し、幅広く社会に提供を図る。

研究開発期間

2006年度～2008年度

(6) 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、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45nm以降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)基盤技術の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

4 - - . その他

(1) 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

（2）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、次世代の衛星技術として期待されている、準天頂衛星システム（移動中の利用者等に対し、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新システム）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、航空機、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のため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。

技術的目標及び達成時期

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）の開発を行う。

研究開発期間

2003年度～2010年度

（3）高効率重金属処理剤研究開発

概要

重金属等によって汚染された土壌、飛灰、ばいじん、排水・廃液等を安全かつ経済的に処理する技術開発として、少量の使用で重金属等を安定的かつ効率的に捕捉できる複合金属汚染土壌のオンサイト処理に適した高性能の無機系重金属等処理剤及び自然環境への負荷が少ない新規有機系処理剤を開発する。

技術的目標及び達成時期

2008年度までに、飛灰における金属選択性が高く安価な重金属等処理・回収剤及び排水中における亜鉛や6価セレンなどを処理できる重金属等処理剤を開発する。

研究開発期間
2003年度～2008年度

4 - . 運輸部門の燃料多様化

4 - - . 共通

- (1) イノベーション実用化補助事業(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)

4 - - . G T L等の合成液体燃料

- (1) 革新的次世代低公害車総合技術開発(運営費交付金)(4 - - 参照)
- (2) 天然ガス未普及地域供給基盤確立実証試験(運営費交付金)(4 - - 参照)
- (3) 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) 新利用形態燃料電池技術開発(運営費交付金)(4 - 参照)
- (4) 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)
- (5) 水素貯蔵材料先端基盤研究事業(運営費交付金)(4 - - 参照)
- (6) 水素社会構築共通基盤整備事業(運営費交付金)(4 - - 参照)
- (7) 燃料電池システム等実証研究(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)

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SBI 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開発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) イノベーション実用化補助金(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

新たな電力供給方式として地上において様々な用途への応用が見込まれ、また、長期的には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の中核的技術として応用可能な太陽光発電無線送受電技術を確立するため、安全性等を確保しつつ、太陽エネルギーを効率良く伝送するための要素技術等について研究開発を行う。

技術目標及び達成時期

2010年度までに高効率半導体増幅回路の開発、複数フェーズドアレイパネルの統合による精密ビーム制御技術の開発、高効率受電整流回路の開発を目指すことにより、無線送受電技術の高効率化を図る。

研究開発期間

2008年度～2010年度

4 - - . 電力系統制御・電力貯蔵

(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) 風力発電電力系統安定化等技術開発(運営費交付金)(4 - - 参照)

(3) 大規模電力供給用太陽光発電系統安定化等実証事業(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の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 - - . 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) 新利用形態燃料電池技術開発(運営費交付金)

概要

ユビキタス社会に対応する燃料電池の実用化・普及拡大を図るため、小型可搬電源となり得る小出力燃料電池等の安全性確保等を目的とする基準・標準化研究開発及び燃料電池の用途開拓のための技術開発を行う。

技術目標及び達成時期

2010年までに、燃料電池の新利用形態、使用環境の拡がり等を考慮した高出力特性等の性能特性向上によって必要となる燃料容器等の周辺機器を含めたシステムの安全・環境基準の設定・標準化、規制緩和に資する試験データの取得、試験方法の開発及びこれらの規格・標準化に準じた新利用携帯用燃料電池技術を開発する。

研究開発期間

2006年度～2010年度

(4) 高耐久性メンブレン型LPガス改質装置の開発(運営費交付金)

概要

高耐久性の水素透過型メンブレン(膜)を開発し、家庭用LPガス供給システムから高純度の水素を供給可能な高効率LPガス改質装置を開発する。

技術目標及び達成時期

2008年度までに、家庭用LPガス供給システムから燃料電池へ高純度の水素を供給する高効率かつ低コストでコンパクトなメンブレン型LPガス改質装置を開発する。

研究開発期間

2006年度～2008年度

(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)

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

(6) セラミックリアクター開発(運営費交付金)

概要

電気化学的に物質やエネルギーを高効率で変換する次世代型セラミックリアクターの実現のため、低温作動と急速作動停止を可能とする材料の開発とマイクロセルの集積構造化技術等の開発を行う。

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/部等)を行う。

研究開発期間

2005年度～2009年度

(7) 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

(8) 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

(9) 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則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則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

(10) 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年度を目的に、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

(11) 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

(12) 定置用燃料電池大規模実証事業(運営費交付金)

概要

定置用燃料電池コージェネレーションシステムの実用化開発を支援するため、量産技術の確立と実用段階に必要なデータ収集を行う大規模実証を実施する。

技術目標及び達成時期

2008年度までに、定置用燃料電池を大規模かつ広域的に設置し、実使用条件下における耐久性等の運転データを取得・分析、コストダウンに向けた課題抽出を行い、製品改良へのフィードバックを行う。

研究開発期間

2005年度～2008年度

(13) 燃料電池システム等実証研究

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

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）

< プルサーマルの推進 >

(2) 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 >

(3) 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 >

(4) 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 >

(5) 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の設計を確定する。

研究開発期間

2008年度～2015年度

< 共通基盤技術開発 >

(6) 革新的実用原子力技術開発費

概要

原子力発電及び核燃料サイクルに関する革新的かつ基盤的技術であって実用化につながる研究開発テーマを競争的環境の下で広く提案公募方式により募集し、将来の原子力技術の発展及び技術の多様化につながる研究開発を行う。

なお、実施に当たっては、研究開発の特性に応じて既存技術分野、基盤技術分野、国際協力技術分野の3分野を設け事業を実施する。

技術目標及び達成時期

2012年まで、既存技術分野、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。

なお、既存技術分野は2008年度で終了となる。

研究開発期間

2000年～2010年（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) 地層処分技術開発

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14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) 管理型処分技術開発

）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開発

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S M E 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

革新的な超電導送電技術を確立するため、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を活用し、実用化のための実証試験及び評価を行う。

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～2011年度

4 - - . その他電力供給安定化技術

(1) 風力発電電力系統安定化等技術開発(運営費交付金)

概要

大規模風力発電所等の普及拡大時において懸念される周波数変動等系統上の問題対策として、蓄電システムの併設による出力安定化技術を開発し、実態に応じたシステム稼働データの抽出や当該システムの有効性の検証を行う。

技術目標及び達成時期

長期実証運転を強いられた大容量システムの耐久性や信頼性を評価するため解体分析調査を行うことにより、当該技術の有効性を検証するとともに、そのシステムを確立する。

研究開発期間

2003年度～2008年度

(2) 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

(3) 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(FCV)・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)。また、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

(4) 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

従来の金属材料と比べ耐食性、耐久性、加工性などの飛躍的な向上が期待できる超高純度金属材料の発電プラント部材としての実用化を目指し、低コスト・量産化製造プロセス、及び加工・溶接技術等の開発を行い、部材としての実用特性の評価・検証を行う。

また、実用化に向けたフィージビリティ調査を行い経済性の評価等を実施するとともに、材料特性に関するデータベースの整備及びそれに必要な試験研究を行う。

技術目標及び達成時

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・利用促進型大型ノ特別研究(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(クリーン・コール・テクノロジーの研究開発の一部)

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、低品位炭の有効利用、石炭生産性の向上のための研究開発等を行う。

技術目標及び達成時期

2009年度までに、インドネシアにおいて低品位炭の有効利用を図ることを目標に、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確立する。

研究開発期間

2001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

PALSAR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ー（COセンサー・メタンセンサー）を開発する。

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および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) 天然ガス未普及地域供給基盤確立実証試験（運営費交付金）

概要

天然ガスの供給手段が存在せず（パイプラインはもとよりサテライト供給でも採算が合わないため）石油等の燃料に依存している地方都市部の中小規模の天然ガス需要に対し、天然ガスハイドレートを利用した、新たな輸送技術を確認する。

技術目標及び達成時期

従来のLNGチェーンによる供給に係る投資コストに対し、そのコストを約1/4に低減する事が可能な天然ガスハイドレート（NGH）供給システムを2008年度までに確立する。

研究開発期間

2006年度～2008年度

(7) 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製造技術を確認する。

研究開発期間

2006年度～2010年度

- (8) 高耐久性メンブレン型 L P ガス改質装置の開発 (運営費交付金) (4 - - 参照)
- (9) 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)
- (1 0) 高効率ガスタービン実用化技術開発 (4 - - 参照)

4 - - . オイルサンド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

2 0 1 6 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

2 0 0 1 年度 ~ 2 0 1 6 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 (I G F C) の開発実証
- ・ 化学吸収法による C O 2 の分離・回収技術の実証
- ・ C O 2 を輸送するための船舶の設計
- ・ C O 2 を貯留するための発生源近傍における貯留ポテンシャルやコストの評価
- ・ 石炭ガス化から CCS まで一貫したトータルシステムの設計等を行う。

技術目標及び達成時期

石炭ガス化については、2 0 0 9 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 C O 2 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。また、C C S については、2 0 1 6 年度頃から C O 2 地中貯留の実証試験に着手する。

研究開発期間

2 0 0 7 年度 ~ 2 0 1 2 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普及事業等を実施し、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、ゼロエミッション型石炭火力発電の実証プロジェクト(Future Genプロジェクト)への参画を通じた石炭ガス化・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。また、将来のCO₂の地中貯留に際しては、国民の正しい理解が不可欠であり、これを念頭においたゼロエミッション型石炭火力発電に係る普及啓蒙活動を積極的に実施する。

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、比較的低コストで極めて大きなCO₂削減効果が期待できる。

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)(クリーン・コール・テクノロジーの

研究開発の一部)

概要

環境適合的な石炭利用の拡大を図るため、石炭ガス化、無灰化技術による転換効率向上に資する技術や石炭からの水素製造技術等、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

2008年度までに、

- ・ 石炭から合成ガスや軽質オイルを併産する高効率な石炭部分水素化プロセス技術を20t/日のパイロットプラント規模で確立する(石炭部分水素化熱分解技術の開発)

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(戦略的炭素ガス化・燃焼技術開発)

研究開発期間

1995年度～2008年度(2008年度見直し)

- ・ 戦略的炭素ガス化・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
- ・ 石炭部分水素化熱分解技術 2003年度～2008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) 環境調和型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) イノベーション実用化補助事業(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) 新利用形態燃料電池技術開発 (運営費交付金)(4 - - 参照)
- (6) 高耐久メンブレン型 L P ガス改質装置の開発(運営費交付金)(4 - - 参照)
- (7) 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)
- (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) 水素貯蔵材料先端基礎研究事業 (運営費交付金)(4 - - 参照)
- (1 0) 水素社会構築共通基盤整備事業 (運営費交付金)(4 - - 参照)
- (1 1) 水素先端科学基礎研究事業 (運営費交付金)(4 - - 参照)
- (1 2) 固体酸化物形燃料電池実証研究 (運営費交付金)(4 - - 参照)
- (1 3) 定置用燃料電池大規模実証事業 (運営費交付金)(4 - - 参照)
- (1 4) 燃料電池システム等実証研究 (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 - ．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アプローチ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 - ．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 - ．新エネルギー等の開発・導入促進

- 事業者支援補助金等による初期需要創出
- 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 - ．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 - ．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。

(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

新エネルギー部

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」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

研究開発を実施する。

[委託事業、共同研究事業(NEDO 負担率:2/3)]

- 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。

平成22年3月に実施する研究開発項目②、③、④に関する追加公募については、(i) 実用化まで長期間を要するハイリスクな「基盤的技術」に対して、産学官の複数事業者が互いのノウハウ等を持ちより協調して実施する事業、又は(ii) 試験・評価方法、基準・プラットフォームの提案等、国民経済的には大きな便益がありながらも、民間企業の研究開発投資に見合うものが見込めない「公共財の研究開発」事業であり、原則、委託事業として実施する。ただし、(i)については、上記以外のもの(※1)は、共同研究事業[NEDO 負担率:2/3]として実施する。

※1 民間企業単独、民間企業のみでの連携、大学等の単独等、産学官連携とならないもの

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が公募によって選定する本邦の企業、大学等の研究機関が、NEDO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客員研究員 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、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項第一号二に基づき実施する。

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。

(4) 平成22年3月、研究内容の拡充(追加公募)にともなう改訂。

(5) 平成23年7月7日、「石油代替エネルギーの開発及び導入の促進に関する法律改正」

に伴う根拠法の変更による改定。

(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-エネルギー革新技術計画」（2008年3月策定）をもとに、足下の2030年頃までの見通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

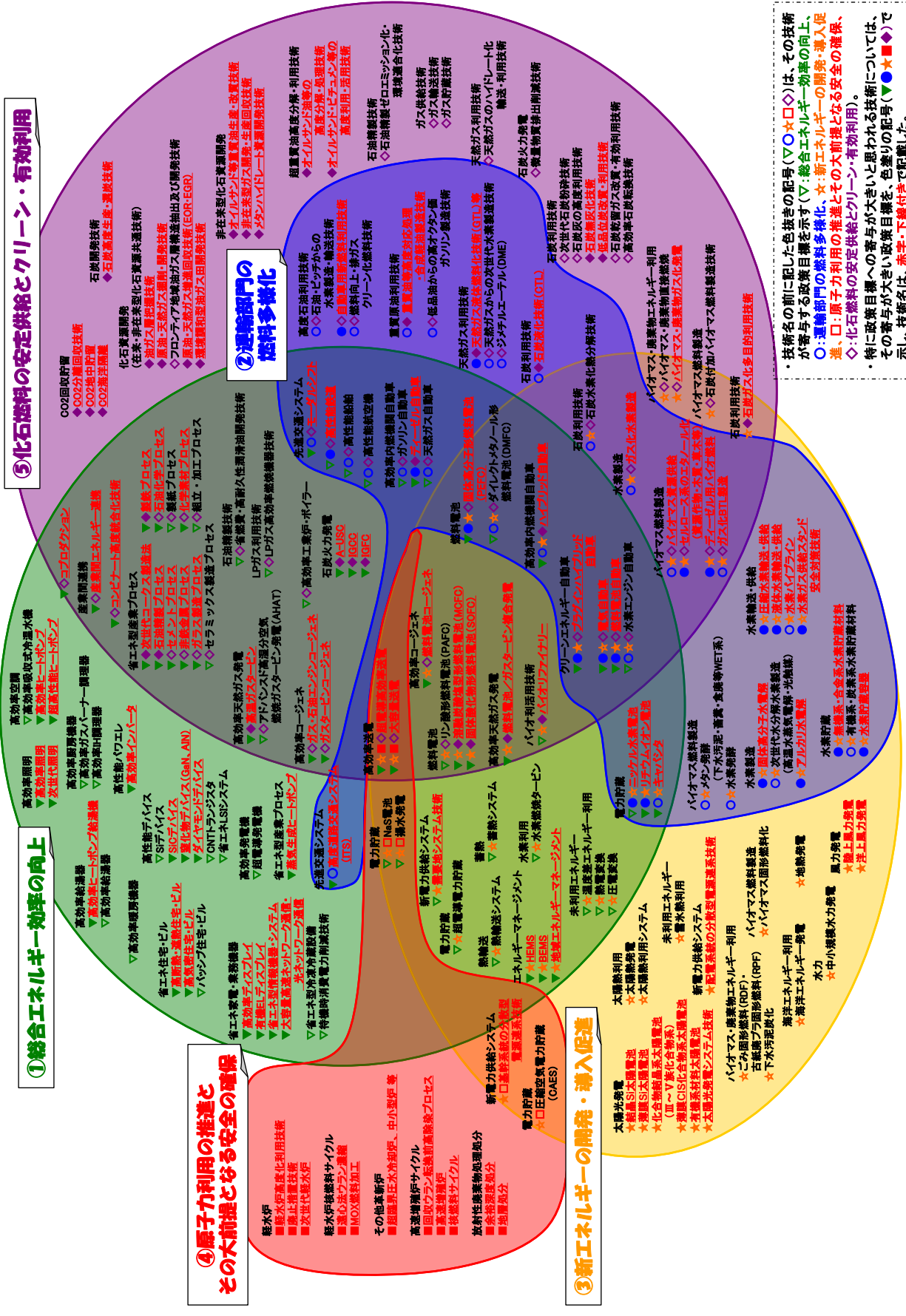
エネルギー技術分野全体を俯瞰するため、有識者にアンケート調査を行い、5つの政策目標に対する寄与について定性的な評価を行った。

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 -

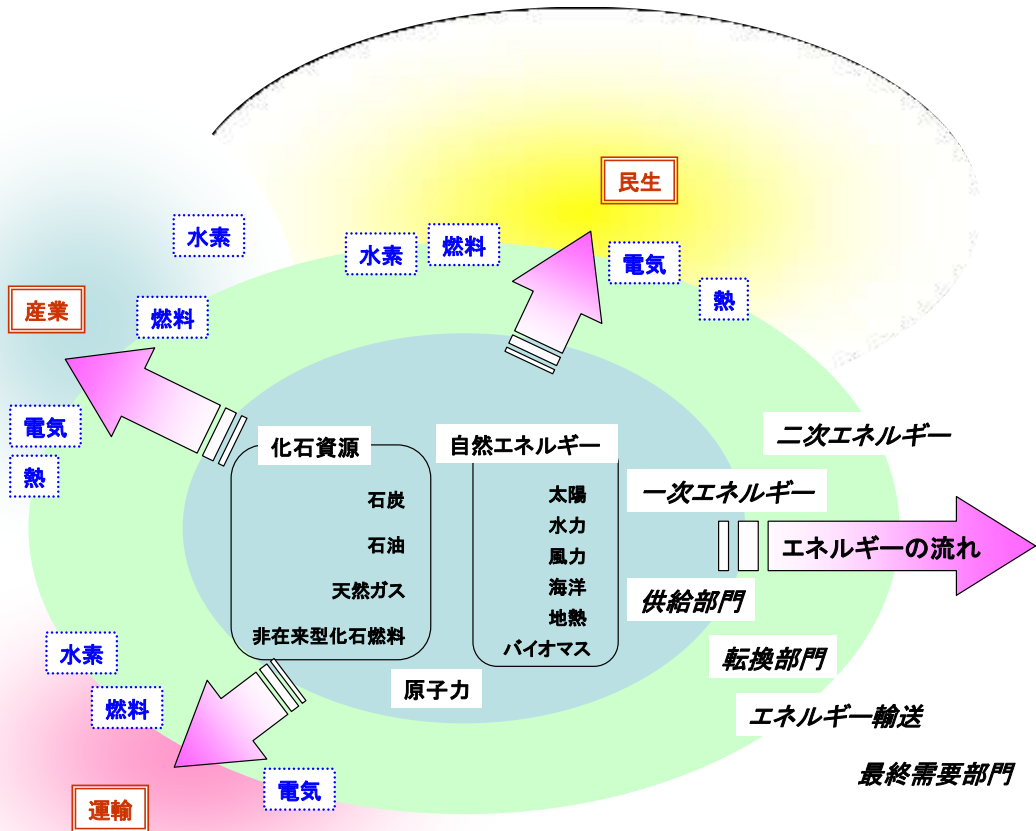


・ 技術名の前に記した色抜きの記号(▽◇△□◇)は、その技術が寄与する政策目標を示す(▽:総合エネルギー効率の向上、◇:運輸部門の燃料多様化、△:新エネルギーの開発・導入促進、□:原子力利用の推進とその大前提となる安全の確保、◇:化石燃料の安定供給とクリーン・有効利用)。
 ・ 特に政策目標への寄与が大きいと思われる技術については、その寄与が大きい政策目標を、色抜きの記号(▽◇△□◇)で示し、技術名は、赤字・下線付きで記載した。

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

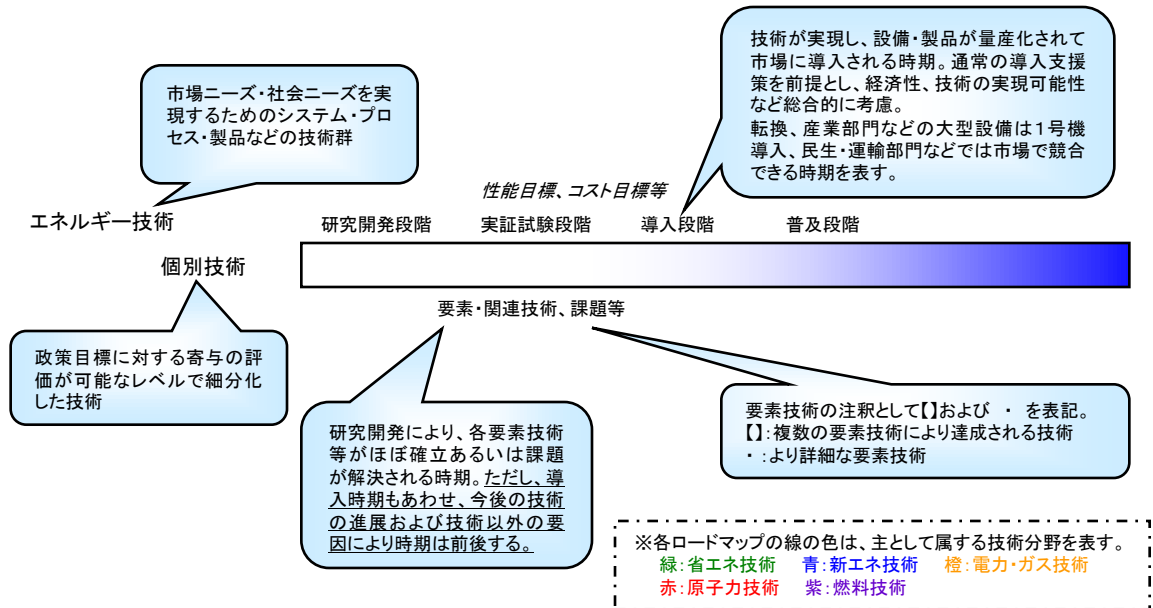
エネルギー分野全体から2030年頃までに実用化され、5つの政策目標に寄与すると思われる178個の技術を洗い出し、それぞれの政策目標の達成に寄与する技術別に、分類・整理してリストとして示すとともに、下図のように一次エネルギー／二次エネルギー／最終エネルギー消費のエネルギーの流れ、電気／熱／燃料等のエネルギーの形態、産業／民生／運輸の需要部門別に整理を行い図示した。



○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。



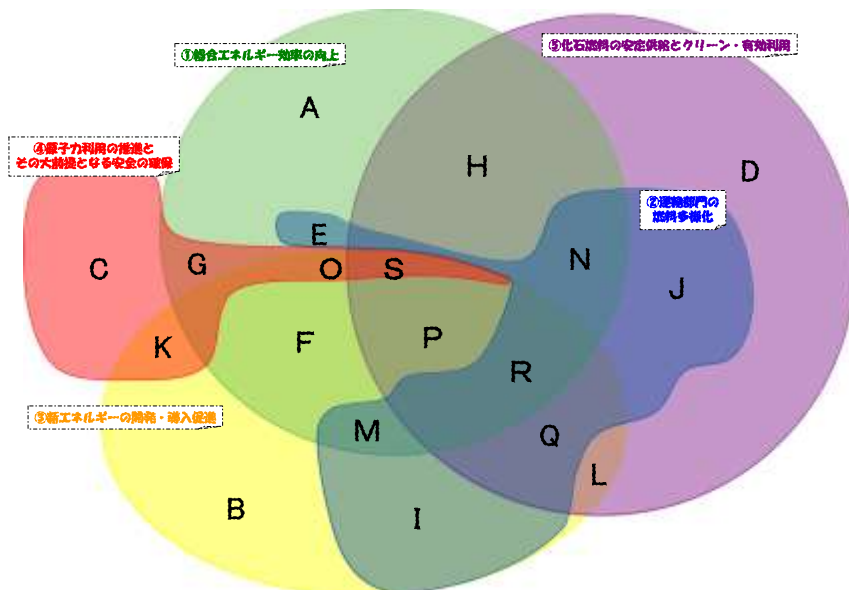
個別技術No. は次の考え方で区分した。

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

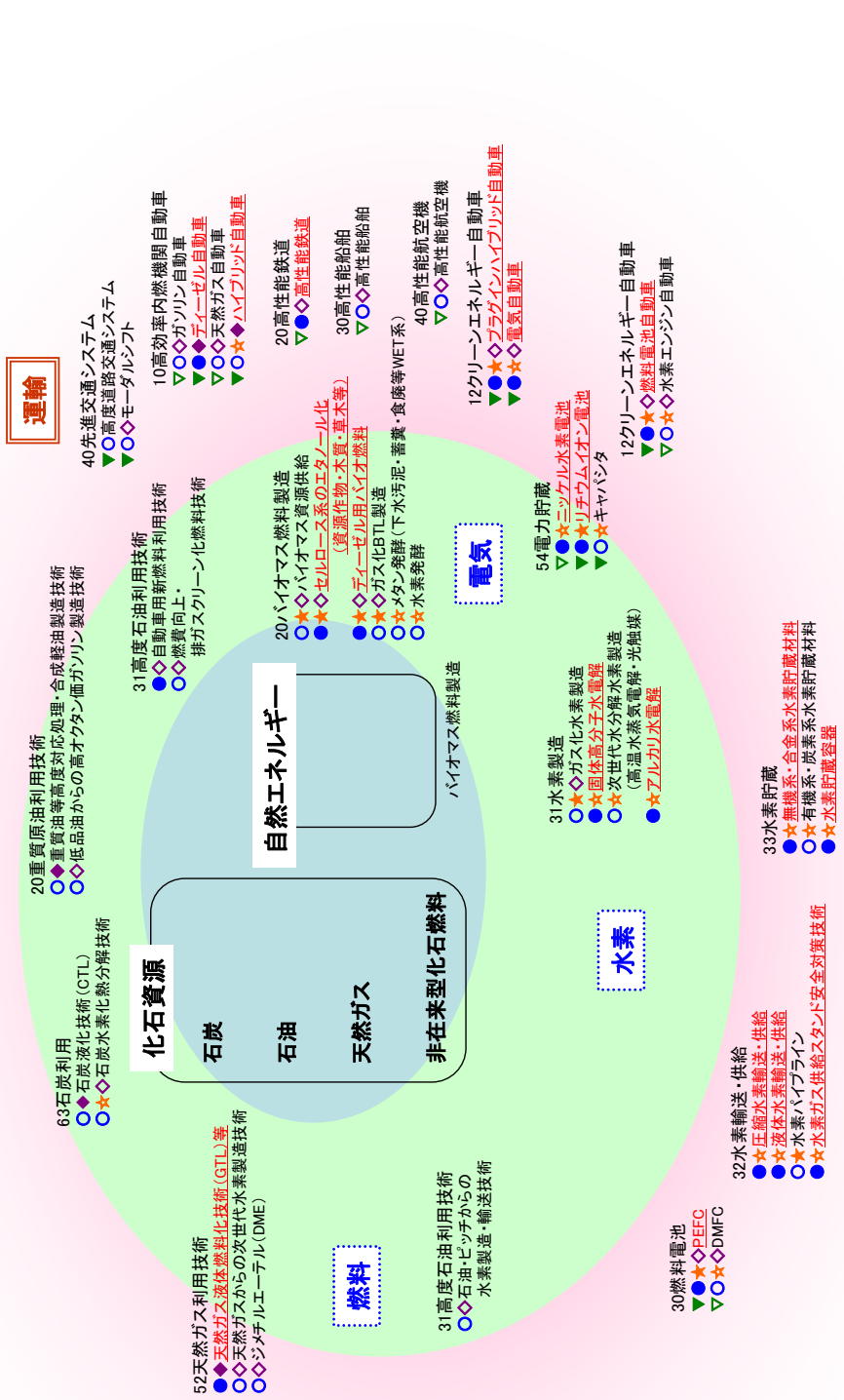
○燃料基準の策定・改定

○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。

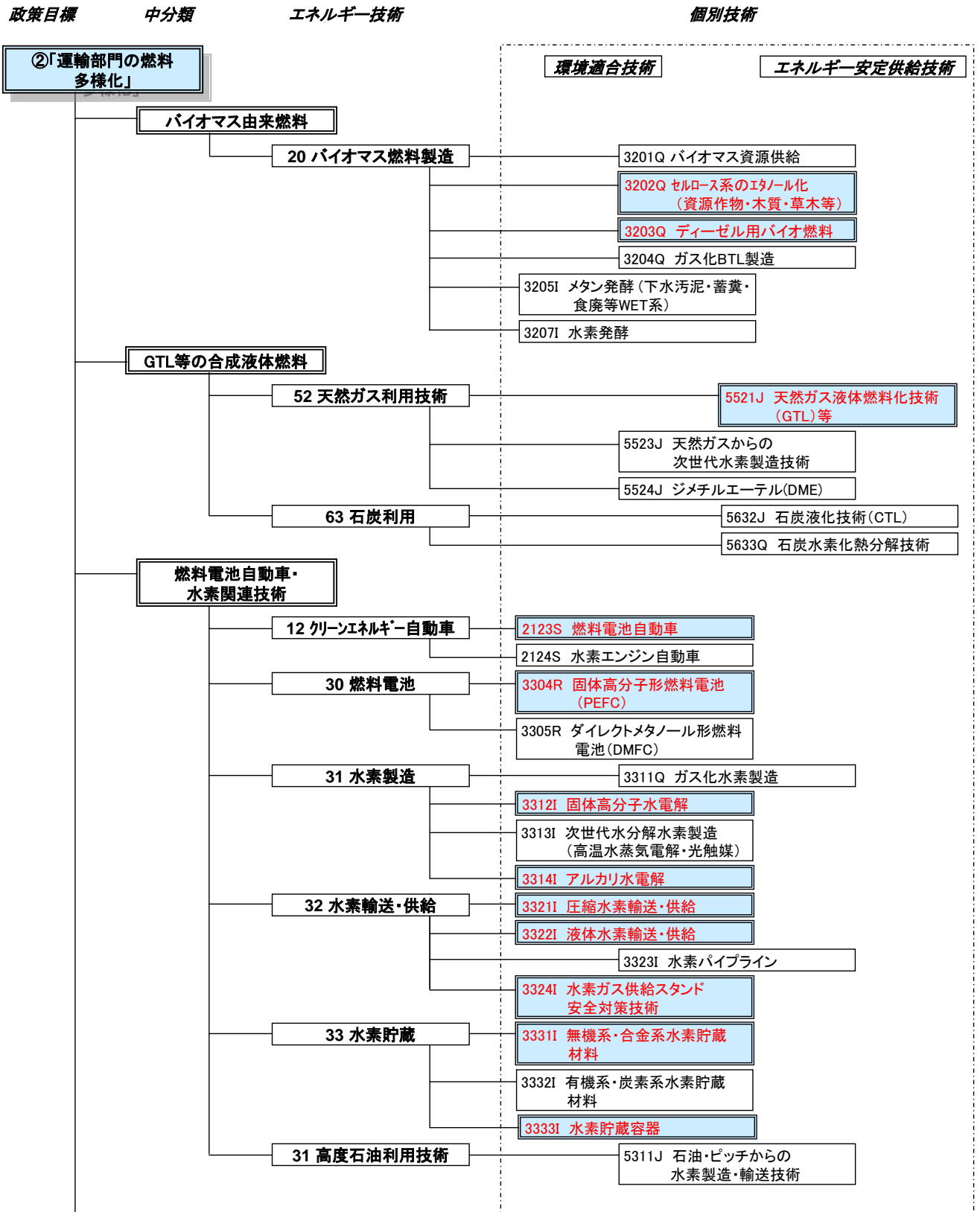


②「運輸部門の燃料多様化」に寄与する技術の技術マップ(整理図)

● 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。

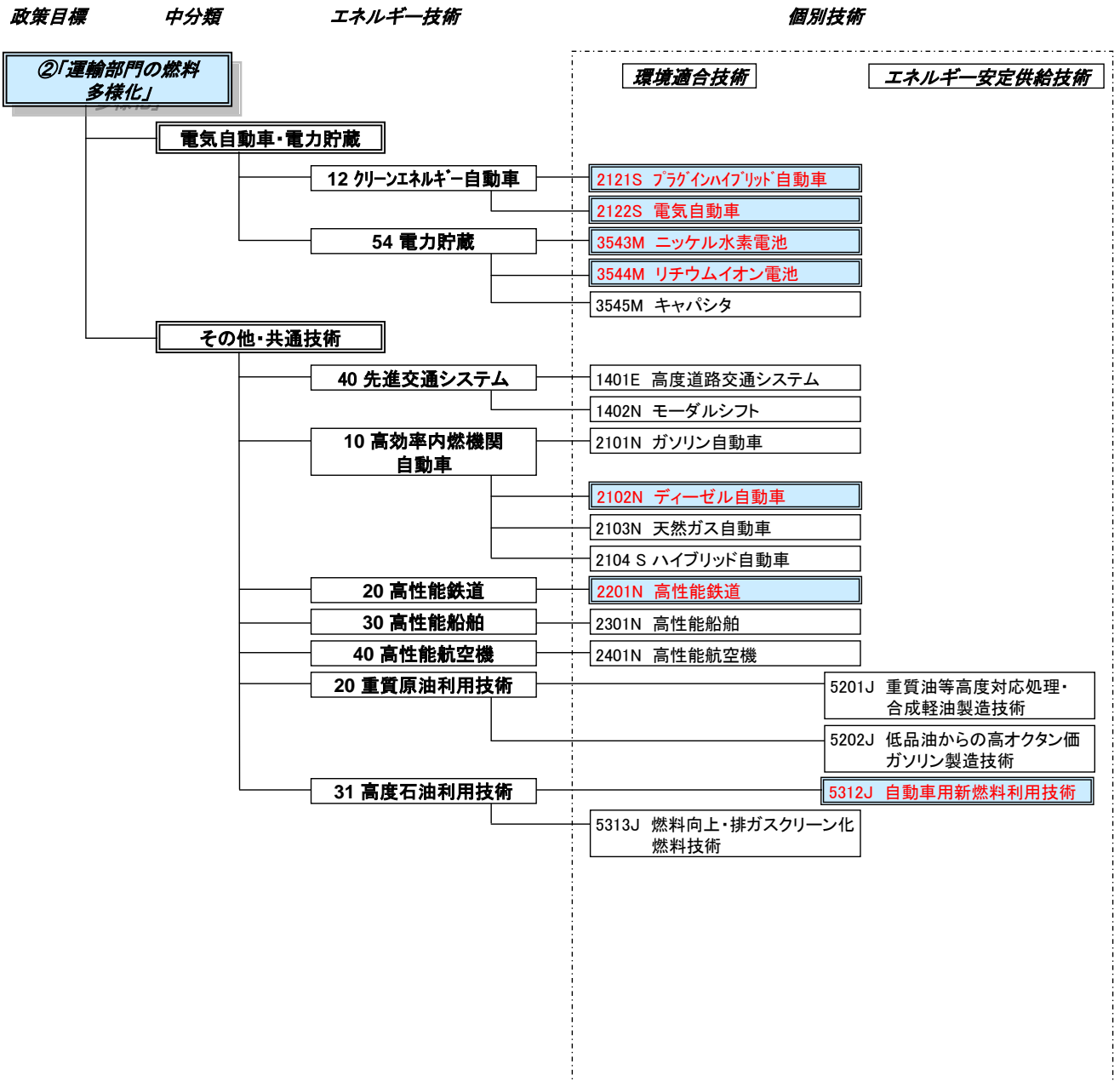
②「運輸部門の燃料多様化」 に寄与する技術の技術マップ(技術リスト)(1/2)

※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アクター 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/Nm3 5 t/d パイロットプラント	80円/Nm3	40円/Nm3		
		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		CO2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/cm2)・80%(2A/cm2) 設備費 約1億8千万円/Nm3/h(300Nm3/h)		75%(3A/cm2)・85%(2A/cm2) 約1億2千万円/Nm3/h(300Nm3/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(Nm3-H2@500Nm3/h)		25万円(Nm3-H2@500Nm3/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/Nm3		7円/Nm3		
		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/Nm3		3円/Nm3		
		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 ポリハイドライド系 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 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 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</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	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)
			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	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 負荷変動補償
			高出力化 高エネルギー密度化 自己放電特性改善			
3544M	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	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		運輸用		
		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	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ーブ走行
			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 VICISシステム ナビゲーションシステム	カーナビ活用エコドライブ制御システム エコドライブルート情報システム		
1402N	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	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		高負荷領域におけるノック抑制 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	

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)

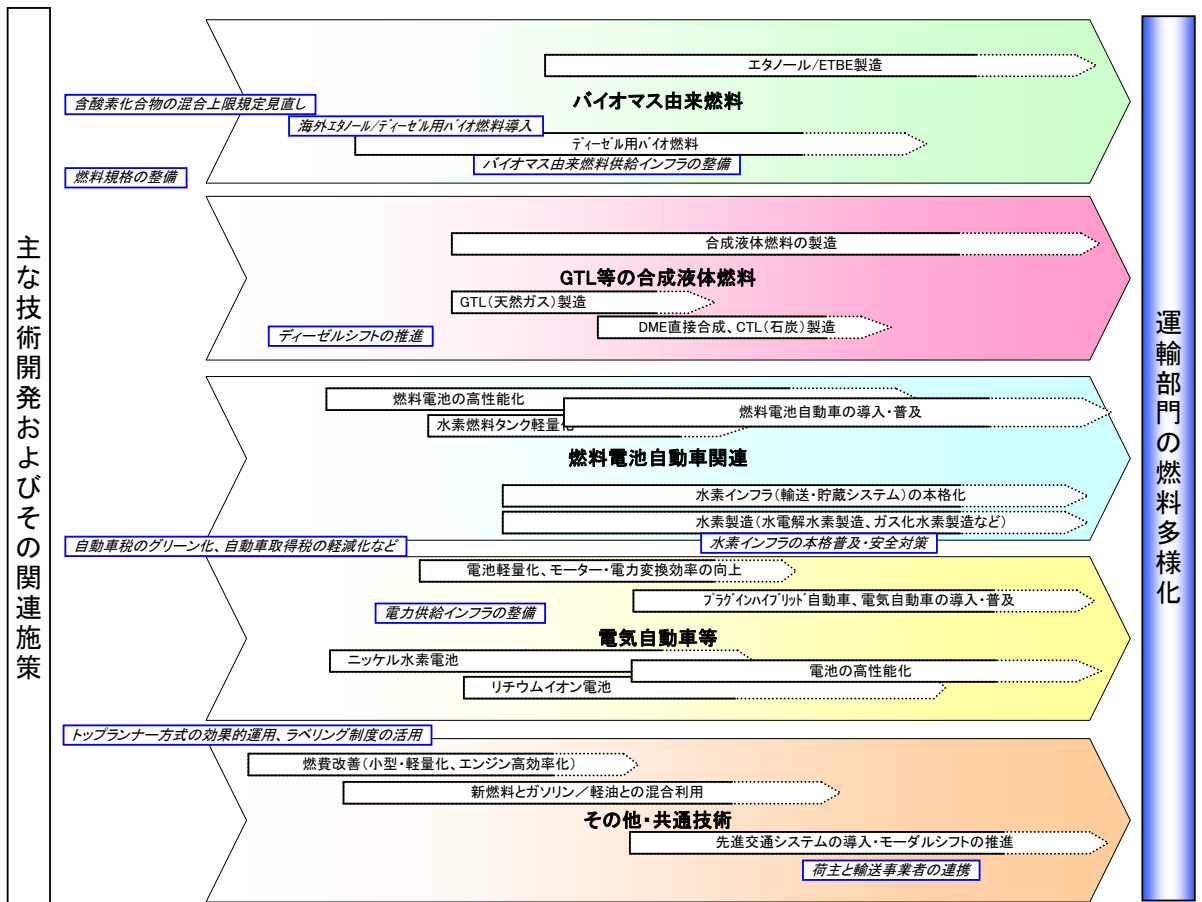
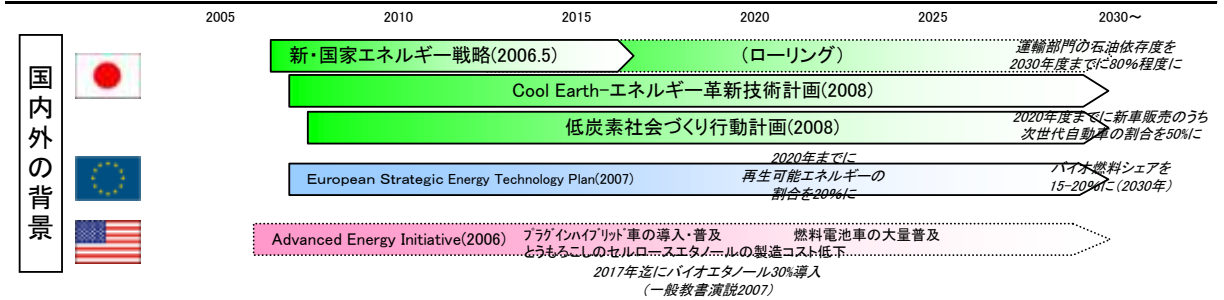
No.	エネルギー技術 個別技術	2010	2015	2020	2025	2030～
2102N	10.高効率内燃機関自動車 ディーゼル自動車					バイオマス等代替燃料・混合燃料利用エンジン技術 低エミッション後処理技術(尿素SCRなど) 高効率・低エミッション燃焼技術 HCCIエンジン
						最適傾斜機能鍛造軽量部材 低摩擦材料表面制御 乗用車用噴射系の向上(超高压化)・小型高過給化 MgCo(OH)系利用実証試験 超強度CFRP製造技術 小型・軽量化 天然ガスエンジンの高効率化(小型化、ハイブリッド化等) ガス供給インフラの拡充
2103N	10.高効率内燃機関自動車 天然ガス自動車					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 充填インフラの低コスト化 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
2104S	10.高効率内燃機関自動車 ハイブリッド自動車					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 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
2201N	20.高性能鉄道 高性能鉄道					高速鉄道 ハイブリッド鉄道車両 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
2301N	23.高性能船舶 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 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 軽量化 燃料電池 エンジン廃熱回収 摩擦抵抗低減技術 ハブ港ネットワーク化 船型等省エネ機器技術 性能評価シミュレーション技術
2401N	24.高性能航空機 高性能航空機					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	20.重質原油利用技術 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 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 重質油のガス化技術 組成制御型高度石油精製技術 重質油からの合成軽油製造技術(ATL)

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

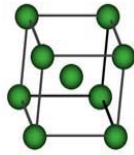
高性能かつ先端的水素貯蔵材料開発に必要な水素貯蔵に関する基本原理の解明及び材料開発への応用技術の基礎研究を幅広い分野で横断的に行い、その成果を先端的材料開発の技術開発指針として産業界へ提供することにより、水業社会の真の実現を目指す。

プロジェクトの規模

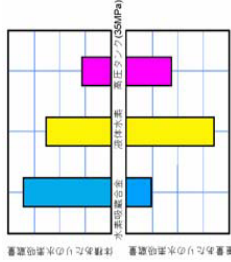
○事業費と研究開発期間(目安として)

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な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

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 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9月28日

内閣府総合科学技術会議科学技術連携施策群 本田主監殿ご視察

会 場：Spring-8（兵庫県佐用町）

※材料物性グループ

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）

※PL、SL

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）

※PL、SL

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）

※金属系グループ、ロスアラモス国立研究所、計算科学グループ、中性子グループ

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）

※PL、SL

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

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

会 場：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

会 場：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

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

2008年2月27日

第1回 国際水素貯蔵フォーラム

会 場：東京国際交流館（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

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、金属系グループ、PL

2008年3月4日

第2回材料物性グループ会議

会 場：Spring-8 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

会 場：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 12 日

第 2 回非金属系グループ会議

会 場：広島大学 (東広島市)

※非金属系グループ

2008 年 5 月 21 日

第 4 回中性子グループ会議

会 場：いばらき量子ビーム研究センター (茨城県東海村)

※中性子グループ

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)

※PL、SL

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10日

第3回非金属系グループ会議

会場：広島大学（東広島市）

※非金属系グループ

2008年7月18日

NEDO 山本副理事長ご視察

会場：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

2008年7月24日

第1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5日

第5回中性子グループ会議

会場：いばらき量子ビーム研究センター（茨城県東海村）

※中性子グループ

2008年8月28日

第2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日～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）

※PL、SL

2008年10月9日～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16日

金属系グループ（産総研）と材料物性グループ（原子力機構）との意見交換会、産総研設備見学

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、材料物性グループ

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）

※PL、SL

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 2 日

金属系グループと計算科学グループ（物材機構）との意見交換会、産総研設備見学

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

2009 年 2 月 3 日～4 日

第 6 回中性子グループ会議 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 10 日

金属系グループ（産総研）と計算科学グループ（物材機構）との意見交換会

会 場：物質・材料研究機構（つくば）

※金属系グループ、計算科学グループ

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(兵庫県佐用町)

※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 4 月 17 日

第 4 回非金属系グループ会議

会 場：広島大学 (東広島市)

※非金属系グループ

2009 年 6 月 2 日

中性子全散乱装置完成披露式典

会 場：いばらき量子ビーム研究センター (茨城県東海村)

※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：いばらき量子ビーム研究センター (茨城県東海村)

※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）

※PLオブザーバ参加

2009年7月10日

第5回非金属系グループ会議

会 場：広島大学（東広島市）

※非金属系グループ

2009年7月23日～24日

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

会 場：ホテル テラスザガーデン水戸（水戸）

※プロジェクト全体

2009年7月23日

第7回中性子グループ会議

会 場：ホテル テラスザガーデン水戸

※中性子グループ

2009年9月9日～10日

第1回 LANL-HU ワークショップ

会 場：ロスアラモス国立研究所（米国）

※非金属系グループ

2009年9月16日

金属系グループ（産総研）と計算科学グループとの意見交換会

会 場：金属学会秋期大会会場

※金属系グループ、計算科学グループ

2009年10月6日

金属系グループ（産総研）、中性子グループ（高エネ機構）と計算科学グループ（産総研）との意見交換会

会 場：産業技術総合研究所 つくばセンター第2（つくば）

※金属系グループ、中性子グループ、計算科学グループ

2009年10月19日

**金属系グループ（産総研）と材料物性グループ（原子力機構）との意見交換会、Spring-8
設備見学および予備実験**

会 場：SPring-8（兵庫県佐用町）

※金属系グループ、材料物性グループ

2009年10月23日

第6回非金属系グループ会議

会 場：広島大学（東広島市）

※非金属系グループ

2009年11月10日

第5回材料物性グループ会議

会 場：SPring-8 萌光館（兵庫県佐用町）

※材料物性グループ

2009年11月12日

第2回 LANL-HU ワークショップ

会 場：広島大学（東広島市）

※非金属系グループ

2009年12月4日

第4回 LANL-NEDO-AIST ワークショップ

**LANL-NEDO-AIST Workshop on Fuel Cell Performance Improvement & Hydrogen Storage
Materials**

会 場：ボストン

※プロジェクト全体、ロスアラモス国立研究所

2009年12月11日

第8回中性子グループ会議

会 場：東北大学金属材料研究所（仙台）

※プロジェクト全体

2009年12月15日

第2回アルミハイドライド研究者会議

会 場：いばらき量子ビーム研究センター（茨城県東海村）

※中性子グループ

2010年1月5日～2月5日

ロスアラモス研の研究員が産総研に滞在

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

2010年1月12日

豊田中研と産総研による今後の進め方に関する検討会

TV会議

※金属系グループ

2010年1月14日～15日

第4回 計算科学G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

2010年1月22日～23日

金属系グループ（産総研、ロスアラモス研）、中性子グループ（高エネ機構）との検討会、J-PARC 設備見学

会 場：J-PARC（茨城県東海村）

※金属系グループ、中性子グループ

2010年1月23日～26日

中性子実験

会 場：J-PARC（茨城県東海村）

※金属系グループ、中性子グループ

2010年2月4日

第9回中性子グループ会議

会 場：高エネルギー加速器研究機構 東海キャンパス 1 号館
※中性子グループ

2010 年 2 月 22 日～23 日

全散乱ワークショップ (LANL-AIST-NEDO workshop)

会 場：いばらき量子ビーム研究センター (茨城県東海村)
※中性子グループ、金属系グループ

2010 年 2 月 24 日

計算科学G代表者会議

会 場：SPring-8 (兵庫県佐用町)
※計算科学グループ、非金属系グループ

2010 年 2 月 25 日～26 日

材料物性G・計算科学G研究打ち合わせ会議

会 場：SPring-8 (兵庫県佐用町)
※計算科学グループ、材料物性グループ

2010 年 2 月 25 日

LANL-AIST/NEDO ワークショップ(水素貯蔵材料)

LANL-AIST-NEDO workshop on Neutron Total Scattering

会 場：J-PARC(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

2010 年 2 月 25 日

第 5 回 JAEA 放射光科学研究シンポジウム

-Material Science on Metal Hydride-

会 場：SPring-8(兵庫県佐用町)
※材料物性グループ

2010 年 3 月 1 日

第 2 回 国際水素貯蔵フォーラム

会 場：東京国際交流館(お台場)
※プロジェクト全体

2010 年 3 月 2 日

第5回 日中水素貯蔵材料セミナー

会 場：東京国際交流館(お台場)

※プロジェクト全体

2010年3月8日

第3回 LANL-HU ワークショップ

会 場：ロスアラモス国立研究所 (米国)

※非金属系グループ

2010年3月25日

金属系グループ(産総研)と計算科学グループ(産総研)との意見交換会

会 場：産業技術総合研究所 つくばセンター第5(つくば)

※金属系グループ、計算科学グループ

2010年3月27日

NEDO 水素貯蔵材料関連プロジェクト連携成果報告会

会 場：つくば国際会議場(つくば)

※プロジェクト全体

平成 22 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

2010 年 4 月 15 日

第 10 回中性子グループ会議

会 場：高エネルギー加速器研究機構 東海キャンパス 1 号館

※中性子グループ

2010 年 5 月 24 日

**金属系グループ (産総研) と材料物性グループ (原子力機構) との時分割 X 線回折実験
に関する打ち合わせ**

会 場：産業技術総合研究所 つくばセンター第 5 (つくば)

※金属系グループ、材料物性グループ

2010 年 6 月 17 日

第 7 回非金属系グループ会議

会 場：広島大学 (東広島市)

※非金属系グループ

2010 年 6 月 21 日

豊田中研と産総研による研究の進捗報告および今後の進め方に関する検討会

TV 会議

※金属系グループ

2010 年 7 月 8 日

平成 21 年度 NEDO 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

2010 年 7 月 8 日

第 7 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：東京国際交流館 (お台場)

※PL、SL

2010年7月9日

**金属系グループ(産総研)と材料物性グループ(原子力機構)とのPd-H系研究に関する
打ち合わせ**

会 場：産業技術総合研究所 つくばセンター第5(つくば)

※金属系グループ、材料物性グループ、中性子グループ

2010年7月15日

第11回中性子グループ会議

会 場：高エネルギー加速器研究機構 東海キャンパス1号館

※中性子グループ

2010年8月11日～8月12日

第5回 計算科学G全体会議

会 場：松島センチュリーホテル(宮城県松島町)

※計算科学グループ

2010年8月17日

第5回 LANL-AIST/NEDO ワークショップ(水素貯蔵材料)

"The 5th LANL-NEDO-AIST Workshop on Hydrogen Storage Materials"

会 場：サンフランシスコ

※プロジェクト全体、NEDO

2010年8月30日

第12回中性子グループ会議

会 場：高エネルギー加速器研究機構 東海キャンパス1号館

※中性子グループ、材料物性グループ、金属系グループ

2010年9月3日

金属系グループ、中性子グループと豊田中央研究所との中性子実験に関する検討

会

会 場：高エネルギー加速器研究機構 東海キャンパス1号館

※金属系グループ、中性子グループ

2010年9月3日

第6回材料物性グループ会議

会 場：Spring-8（兵庫県佐用町）

※材料物性グループ

2010年10月18日

第8回非金属系グループ会議

会 場：広島大学（東広島市）

※非金属系グループ

2010年10月25日

第13回中性子グループ会議

会 場：高エネルギー加速器研究機構 東海キャンパス1号館

※中性子グループ、材料物性グループ

2010年11月22日

第8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(霞が関)

※PL、SL

2010年11月24日

第14回中性子グループ会議（S型課題研究会）

会 場：高エネルギー加速器研究機構 東海キャンパス1号館

※中性子グループ、材料物性グループ、金属系グループ

2010年12月12日～12月13日

第6回 材料物性G会議

会 場：Spring-8(兵庫県佐用町)

※材料物性グループ、PL、NEDO

2010年12月12日～12月13日

水素貯蔵・計算材料ワークショップ

Workshop on Computational Materials Science on Hydrogen Storage (WCMS-HS)

会 場：東北大学金属材料研究所／ホテル松島大観荘（宮城県仙台市／松島町）

※計算科学グループ、東北大金研、一般参加者

2011年1月13日

第4回 水素貯蔵材料先端基盤研究事業 技術検討会議

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

2011年1月14日

金属系グループ（産総研）と材料物性グループ（原子力機構）との時分割 X 線回折実験 に関する打ち合わせ

会 場：産業技術総合研究所 つくばセンター第5（つくば）

※金属系グループ、材料物性グループ

2011年1月19日

豊田中研と産総研による研究の進捗報告および今後の進め方に関する検討会

会 場：産業技術総合研究所 臨海副都心センター（台場）

※金属系グループ

2011年2月17日

NOVA データ解析打ち合わせ

会 場：高エネルギー加速器研究機構 東海キャンパス1号館

※中性子グループ、金属系グループ

2011年2月23日～28日

ロスアラモス研研究員が産総研に滞在

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

2011年2月24日

金属系グループ（産総研、ロスアラモス研）、中性子グループ（高エネ機構）との意見 交換、J-PARC の設備およびNOVA の見学

会 場：J-PARC（茨城県東海村）

※金属系グループ、中性子グループ

2011年3月1日

水素貯蔵材料フォーラム 2011

会 場：東京国際交流館（お台場）

※プロジェクト全体

2011年3月1日

第7回材料物性グループ会議

会 場：日本原子力研究開発機構東京事務所(東京都千代田区)

※材料物性グループ

平成 23 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

2011 年 4 月 28 日

産総研とロスアラモス研による研究内容と今年度の進め方に関する打合せ

会 場：MRS Spring Meeting 会場(サンフランシスコ)

※金属系グループ

2011 年 5 月 13 日

金属系グループ(産総研)と材料物性グループ(原子力機構)との検討会

会 場：SPring-8(兵庫県佐用町)

※金属系グループ、材料物性グループ

2011 年 5 月 27 日

水素貯蔵材料先端基盤研究事業 検討会

会 場：NEDO 日比谷オフィス

※PL、SL、企業

2011 年 5 月 27 日

材料物性グループ(原子力機構)と計算科学グループ(物材機構)との研究打ち合わせ

会 場：物質・材料研究機構(つくば)

※材料物性グループ、計算科学グループ

2011 年 6 月 2 日

非金属系グループ研究討論会

会 場：北海道大学(札幌市)

※非金属系グループ

2011 年 6 月 30 日

第 15 回中性子グループ会議

会 場：高エネルギー加速器研究機構 東海キャンパス 1 号館

※中性子グループ、材料物性グループ、金属系グループ

2011年10月3日～10月4日

平成22年度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

2011年11月7日

第9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：(沖縄)

※PL、SL、NEDO 藤井主査

2011年12月6日

豊田中央研究所と産総研による研究の進捗報告および今後の進め方に関する検討会

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

2011年12月7日

金属系グループ(産総研)と中性子グループとの打合せ

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、中性子グループ

2011年12月12日～12月14日

水素貯蔵物質・材料の研究討論会

会場：北海道大学 工学研究院 材料化学棟 (札幌市)

※非金属系グループ、計算科学グループ

2012年1月26日

水素貯蔵材料先端基盤研究事業(HYDRO☆STAR)最終報告会

会場：東京国際交流館(お台場)

※プロジェクト全体

2012年1月30日～1月31日

Physics of Hydrogen in Materials

会場：大阪大学産業科学研究所

※計算科学グループ、金属系グループ、非金属系グループ

特許・論文・発表・プレスリリース・受賞・その他リスト

特許【全8件】

平成20年度【3件】

※詳細は非公開情報

平成21年度【1件】

※詳細は非公開情報

平成22年度【1件】

※詳細は非公開情報

平成23年度【3件】

※詳細は非公開情報

論文・雑誌等掲載【全 260 件（重複除く）】 平成 19 年度【6 件（重複除く）】

（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

（非金属系 G：広島大学）

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2008/2/1	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

（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	誌上発表 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）

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

（計算 G：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	Structural Stability of Hydrogen Storage Materials	M.Katagiri H. Onodera

	(Proceedings of ICCES'08), p.331-388 (2008)		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
2008/2/1	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【36件（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	誌上発表 NUCLEAR INSTRUMENTS & METHODS IN PHYSICS RESEARCH SECTION A-ACCELERATORS SPECTROMETERS DETECTORS AND ASSOCIATED EQUIPMENT	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
2008/9/1	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
2008/8/1	学術論文 炭素, 46, 1628 (2008)	Hydrogenation properties of lithium intercalated graphite	W. Ishida H. Miyaoka T. Ichikawa Y. Kojima
2009/1/1	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
2008/6/1	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
2008/12/1	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
2008/12/1	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

2008/7/1	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, 1042-S03-11.	Hydrogen Degradation Property of Electrochemically Charged Aluminum	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: Conference Series, Vol. 121 (2008), p. 042011.	Raman and Visible Absorption Study of ScH3 at high pressure	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), pp. 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 AlH3 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	水素貯蔵材料の高圧中性子散乱実験	町田 晃彦 大友 季哉

	圧力学会誌) Vol. 19, No. 1 (2009), pp. 24-30.		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	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
2009/3/20	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 : 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
2008/6/1	誌上発表 Proceedings of	Computer Simulation of	M.Katagiri

	Nanotechnology 2008, CDRom, 2008.	Hydrogen Storage Materials	H.Onodera H.Ogawa
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
2009/6	誌上発表 Int. J. Nanoscience, 8, 39-42(2009)	Molecular Dynamics Simulation on Hydrogen Storage in Metallic Nanoparticles	H. Ogawa A. Tezuka H. Wang T. Ikeshoji M. Katagiri
2009/8	誌上発表 Int. J. Nanoscience, 8, 49-52(2009)	First principles analysis on hydrogen hopping in LaNi ₅	A. Tezuka H. Wang H. Ogawa T. Ikeshoji
2009/8	誌上発表 Int. J. Nanoscience, 8, 345-349(2009)	Electronic and Crystal Structural Changes in bcc Type Hydrogen Storage Materials	Y. Tanaka M. Katagiri H. Onodera H. Ogawa
2009/8	誌上発表 Int. J. Nanoscience 8, 409-413(2009)	Reconstruction of Pressure-Composition-Temperature Curves of RNi ₅ (R = La, Pr, Nd, And Sm) Hydrogen Storage Materials by Computer Simulation	T. Vasileios 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 Nanotechnology 2008, CDROM, 2008.	Computer Simulation of Hydrogen Storage Materials	M.Katagiri H.Onodera H.Ogawa
2008/10/27	誌上発表 Proceedings of Fourth International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2008), CDROM, 2008.	Structural Stability of Hydrogen Storage Materials	M.Katagiri H.Onodera H.Ogawa
2009/8	誌上発表 Int. J. Nanoscience, 8, 345-349(2009)	Electronic and Crystal Structural Changes in bcc Type Hydrogen Storage Materials	Y. Tanaka M. Katagiri H. Onodera H. Ogawa
2009/8	誌上発表 Int. J. Nanoscience 8, 409-413(2009)	Reconstruction of Pressure-Composition- Temperature Curves of RNi ₅ (R = La, Pr, Nd, And Sm) Hydrogen Storage Materials by Computer Simulation	T. Vasileios 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
2009/8/6	J. Chem. Phys. 131 (2009) 114507	Theoretical Study of Phase Transitions in Kr and Ar Clathrate Hydrates from Structure II to Structure I under Pressure	O. Subbotin T. Adamova R. Belosludov H. Mizuseki Y. Kawazoe J. Kudoh P. M. Rodger V. Belosludov
2009/8/12	Phys. Status Solidi B 246 (2009) 2248-2256	Clustering of Functional Molecules on a Single-walled Carbon-nanotube Surface and its Effect on Hydrogen	K. Iyakutti V. J. Surya M. Rajarajeswari

		Storage	N. S. Venkataramanan Y. Kawazoe
2009/7/27	Carbon 47 (2009) 3306-3312	Geometrical Indications of Adsorbed Hydrogen Atoms on Graphite Producing Star and Ellipsoidal Like Features in Scanning Tunneling Microscopy Images: Ab Initio Study	M. Khazaei M. S. Bahramy A. Ranjbar H. Mizuseki Y. Kawazoe
2009/6/12	誌上发表 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
2009/7/29	NANO 4 (2009) 253-263	Hydrogen Storage on Nanofullerene Cages	N.S. Venkataramanan H. Mizuseki Y. Kawazoe
2009/9/12	J. Appl. Phys. 106 (2009) 094303	Chemical Engineering of Prehydrogenated C and BN-sheets by Li: Application in Hydrogen Storage	M. Khazaei M. S. Bahramy N.S. Venkataramanan H. Mizuseki Y. Kawazoe
2009/12/29	J. Chem. Phys. 131 (2009) 244510	Accurate Description of Phase Diagram of Clathrate Hydrates at the Molecular Level	R. Belosludov O. Subbotin H. Mizuseki Y. Kawazoe V. Belosludov

(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
2009/2/1	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
2009/3/1	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【60件（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/	Nanotechnology, 20(2009)204015. 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, 477(2009)205. 誌上発表	Behavior of vacancy formation and recovery during hydrogenation cycles in LaNi _{4.93} Sn _{0.27}	榎 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, 113(2009)5853, 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, 48(2009)20. 誌上発表	水素の貯蔵輸送と水素貯蔵材料	秋葉 悦男
2009/9/	工業材料, 57(2009)41.	普及の鍵を握る水素貯蔵材料の動向	秋葉 悦男
2009/11/	JOURNAL OF SYNCHROTRON RADIATION Vol. 16(2009) pp. 723-729	Development of an energy-domain 57Fe-Mössbauer spectrometer using synchrotron radiation and its application to ultrahigh-pressure studies with a diamond anvil cell	三井 隆也 平尾 直久 大石 泰生 増田 亮 中村 優美子 榎 浩利 榎 浩司 瀬戸 誠
2009/9/12	Journal of Synchrotron Radiation Vol.16 (2009) pp.723-729	Development of an energy domain synchrotron radiation 57Fe-Mössbauer spectrometer and its application to ultrahigh-pressure	T. Mitsui N. Hirao Y. Ohishi R. Masuda

		study with a diamond anvil cell	Y. Nakamura H. Enoki K. Sakakie M. Seto
2009/12/	化学工業, 60(2009)904.	水素貯蔵技術開発と水素貯蔵材料研究の現状と展望	秋葉 悦男
2010/1/	ペトロテック, 30(2010)58.	中性子回折法を用いた構造解析	中村 優美子

(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
2009/	学術論文 Journal of Materials Research, 24 , 2185(2009)	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
2009/6/	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

2009/6/	学術論文 The Journal of Physical Chemistry C, 113 , 13450 (2009)	X-ray Absorption Spectroscopic Study on Valence State and Local Atomic Structure of Transition Metal Oxides Doped in MgH ₂	N. Hanada, T. Ichikawa S. Isobe T. Nakagawa K. Tokoyoda T. Honma H. Fujii Y. Kojima
2009/10/	学術論文 International Journal of Hydrogen Energy, 34 , 9760 (2009)	Recyclable Hydrogen Storage System Composed of Ammonia and Alkali Metal Hydride	H. Yamamoto H. Miyaoka S. Hino H. Nakanishi T. Ichikawa Y. Kojima
2010/1/	学術論文 Journal of Chemical Thermodynamics, 42 , 140 (2010)	Thermodynamic Properties of Metal Amides Determined by Ammonia Pressure-Composition Isotherms	S. Hino T. Ichikawa Y. Kojima
2010/1/	学術論文 Journal of Molecular Structure THEOCHEM 944 , 137-145 (2010)	H ₂ desorption from LiH cluster and NH ₃ molecule studied by ab initio molecular dynamics simulation	A. Yamane F. Shimojo K. Hoshino T. Ichikawa Y. Kojima
2010/1/	学術論文 International Journal of Hydrogen Energy 35 , 2058-2062 (2010)	Reaction between Magnesium Ammine Complex Compound and Lithium Hydride	M. Tsubota S. Hino H. Fujii C. Oomatsu M. Yamane T. Ichikawa Y. Kojima

(非金属系 G : 北海道大学)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2009	Proceedings for MRS Fall Meeting, 1216-W03-34, 2009	In-site TEM observation for reaction of LiH and NaH with NH ₃ by means of environmental cell	Hirasawa S. Isobe Y. Wang H. Yamamoto

			H. Miyaoka N. Hashimoto S. Ohnuki T. Ichikawa Y. Kojima
2009	Proceedings for MRS Fall Meeting, 2009	In-situ TEM observation for reaction mechanism in MgH ₂ hydrogen storage material,	A. Ono S. Isobe Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki
2010/3	学術論文 日本金属学会誌 第74巻第3号 pp205-208.	In-situ TEM observation for reaction mechanism in MgH ₂ hydrogen storage material	A. Ono S. Isobe Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki

(非金属系 G : 上智大学)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2009/6/	学術論文 The Journal of Physical Chemistry C, 113 , 13450 (2009)	X-ray Absorption Spectroscopic Study on Valence State and Local Atomic Structure of Transition Metal Oxides Doped in MgH ₂	N. Hanada, T. Ichikawa S. Isobe T. Nakagawa K. Tokoyoda T. Honma H. Fujii Y. Kojima
2010/2	学術論文 日本金属学会誌 第74巻第2号 pp65-71.	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
2010	学術論文 Mater. Res. Soc. Symp. Proc., Volume 1216, 1216-W08-24, (2010).	Electrochemical charge for the formation of metal hydrides from LiH+M(M=Mg, Al)	N. Hanada A. Kamura H. Suzuki K. Takai T. Ichikawa Y. Kojima

(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
2009/6/2	Transactions of the Japan Society for Aeronautical and Space Sciences, Space Technology Japan, Vol.7 (2009) pp. Pc 37-Pc 42.	Si-doping for the protection of hydrogenated diamond-like carbon films in a simulated atomic oxygen environment in low earth orbit	K. Yokota M. Tagawa A. Kitamura K.Matsumoto A. Yoshigoe Y. Teraoka J. Fontaine M. Belin
2009/7/	SPring-8 Research Frontiers 2008, pp.62-63	In situ X-ray diffraction measurement on the hydrogenation and dehydrogenation of aluminum at high pressure and temperature	H. Saitoh K. Aoki
2009/9/12	Journal of Synchrotron Radiation Vol.16 (2009) pp.723-729	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
2009/10/1	未来を拓く原子力 原 子力機構の研究開発成 果 2009, p.47	水素エネルギー社会実現へ向けた 材料開発へ指針	齋藤寛之
2009/10/1	JAEA R&D Review 2009, p.47	Toward a Hydrogen Utilizin Society	H. Saitoh
2009/11/10	J. Phys: Conference	Effect of hydrogenation on the	N. Ishimatsu

	Series 190, 012070 (2009)	electronic state of metallic La hydrides probed by X-ray absorption spectroscopy at the La L-edges	R. Sasada H.Maruyama T. Ichikawa H. Miyaoka T. Kimura M. Tsubota Y. Kojima T. Tsumuraya T. Oguchi N.Kawamura A. Machida
2009/12/12	Processing and Fabrication of Advanced Materials XVIII (PFAM-XVIII) proceedings volume	Hydrogenation and dehydrogenation of passivated aluminum under high pressure	H. Saitoh A. Machida Y. Sakurai Y. Katayama K. Aoki
2010/2/19	Journal of Alloys and Compounds, 496 (2010) L24.	Formation and crystal growth process of AlH ₃ in Al-H system	齋藤寛之 岡島由佳 米田安宏 町田晃彦 川名大地 綿貫徹 片山芳則 青木勝敏
2010/3/23	Journal of Physics: Conference Series 215 (2010) 012024.	For high-pressure experiments using total scattering spectrometer NOVA at J-PARC	T. Hattori Y. Katayama A. Machida T Otomo K Suzuya
2010/3/23	Journal of Physics: Conference Series, 215 (2010) 012080.	Structure of liquid iron hydrogen alloy under high pressure	Y. Katayama H. Saitoh Y. Yomogida K. Aoki
2010/3/23	Journal of Physics: Conference Series 215 (2010) 012127.	In situ X-ray diffraction measurement of the hydrogenation and dehydrogenation of aluminum and characterization of the recovered AlH ₃	齋藤寛之 櫻井陽子 町田晃彦 片山芳則

			青木勝敏
2010/3/	高圧ガス Vol. 47、No. 3, (2010) pp.28-29.	水素貯蔵材料として期待されるアルミニウム水素化物の新合成法	齋藤寛之

(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
2009/6/2	Transactions of the Japan Society for Aeronautical and Space Sciences, Space Technology Japan, Vol.7 (2009) pp. Pc 37-Pc 42.	Si-doping for the protection of hydrogenated diamond-like carbon films in a simulated atomic oxygen environment in low earth orbit	K. Yokota M. Tagawa A. Kitamura K.Matsumoto A. Yoshigoe Y. Teraoka J. Fontaine M. Belin

(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
2009/9/12	Journal of Synchrotron Radiation Vol.16 (2009) pp.723-729	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	学術誌上发表	High-pressure synthesis and characterization of new platinum hydride	N. Hirao H. Fujihisa Y. Ohishi H. Orita K. Takemura T. Kikegawa

(材料物性 G : 広島大学理学研究科)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2009/11/10	J. Phys: Conference Series 190 , 012070 (2009)	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 : 東北大学 大学院工学研究科)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2009/4/10	Appl. Phys. Lett. 94 , 141912 (2009)	Experimental and computational studies on structural transitions in the LiBH ₄ - LiI pseudobinary system.	H. Oguchi M. Matsuo J. S. Hummelshøj T. Vegge J. K. Nørskov T. Sato Y. Miura H. Takamura H. Maekawa S. Orimo
2009/10/26	J. Am. Chem. Soc., 131 , 16389-16391 (2009)	Complex hydrides with (BH ₄) ⁻ and (NH ₂) ⁻ anions as new lithium fast-ion conductors.	M. Matsuo A. Remhof P. Martelli R. Caputo M. Ernst Y. Miura T. Sato H. Oguchi H. Maekawa H. Takamura

			A. Borgschulte A. Züttel S. Orimo
2009/12/14	解説記事 次世代型二次電池材料の開発、 監修 金村聖志、シーエムシー 出版、53-66 (2009)	「固体水素化物電解質」	前川英己
2010/3/31	Solid State Ionics, 192 , 118-121	Lithium ion conduction in lithium borohydrides under high pressure.	H. Takamura Y. Kuronuma H. Maekawa M. Matsuo S. Orimo

(計算科学G：産業技術総合研究所)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2009/10	International Journal of Nanoscience, 8(1-2), 39-42 (2009).	Molecular Dynamics Simulation on Hydrogen Storage in Metallic Nanoparticles	Hiroshi Ogawa Akinori Tezuka Hao Wang Tamio Ikeshoji Masahiko Katagiri
2009/10	International Journal of Nanoscience (8 (4-5), pp. 345-349)	Electronic and Crystal Structural Changes in BCC Type Hydrogen Storage Materials	Yoshinori Tanaka Masahiko Katagiri Hidehiro Onodera Hiroshi Ogawa
2009/10	International Journal of Nanoscience (8 (4-5), pp. 409-413)	Reconstruction of Pressure-Composition-Temperature Curves of RNi ₅ (R = La, Pr, Nd, and Sm) Hydrogen Storage Materials by Computer Simulation	Vasileios Tserolas Masahiko Katagiri Hidehiro Onodera Hiroshi Ogawa
2010/1	Materials Research Society Symposium Proceedings, Vol. 1216E W08-30 (2010)	First-Principles study on Hydrogen atom hopping in NaAlH ₄	Hao Wang Akinori Tezuka Hiroshi Ogawa Tamio Ikeshoji
2010/1	Mater. Res. Soc. Symp. Proc., 1216 (2010) W03-02	Atomistic Simulation on Hydrogen Storage in Metallic Nanoparticles	Hiroshi Ogawa Masahiko Katagiri
2010/1	Materials Research Society Symposium Proceedings,	First-Principles Calculations of Phonon and Thermodynamic	Shigeki Saito Masahiko Katagiri

	Vol. 1216E W03-01 (2010)	Properties of Hydrogen Storage a-LaNi ₅ -H	Vasileios Tserolas Jun Nakamura Hidehiro Onodera Hiroshi Ogawa
2010/1	Materials Research Society Symposium Proceedings, Vol. 1216E W08-05 (2010)	A Molecular-Dynamics Study on Metal-Immersed Hydrogen Fluids	Yasushi Takeuchi Masahiko Katagiri Hidehiro Onodera Hiroshi Ogawa
2010/2	Transactions of MRS-J, 35(2), 221-226(2010)	Thermodynamical Modeling of P-C Isotherms for Metal Hydride Materials	Vasileios Tserolas Masahiko Katagiri Hidehiro Onodera Hiroshi Ogawa
2010/4	J. Phys. Cond. Matter, 22, 205503 (2010)	First-principles study on hydrogen vacancy in sodium alanate with Ti substitution	Hao Wang Akinori Tezuka Hiroshi Ogawa Tamio Ikeshoji
2010/4	Phys. Rev. B, 81, 134304 (2010)	Potential energy surface and hopping path for hydrogen in LaNi ₅	Akinori Teduka Hao Wang Hiroshi Ogawa Tamio Ikeshoji
2010/5	Phys. Rev. B, 81, 184302 (2010)	Quantum state of hydrogen in LaNi ₅	Tomoaki Kaneko Akinori Teduka Hiroshi Ogawa Tamio Ikeshoji

(計算科学G：物質・材料研究機構)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2009/10	International Journal of Nanoscience, 8(1-2), 39-42 (2009).	Molecular Dynamics Simulation on Hydrogen Storage in Metallic Nanoparticles	Hiroshi Ogawa Akinori Tezuka Hao Wang Tamio Ikeshoji Masahiko Katagiri
2009/10	International Journal of Nanoscience (8 (4-5), pp. 345-349)	Electronic and Crystal Structural Changes in BCC Type Hydrogen Storage Materials	Yoshinori Tanaka Masahiko Katagiri Hidehiro Onodera Hiroshi Ogawa

2009/10	International Journal of Nanoscience (8 (4-5), pp. 409-413)	Reconstruction of Pressure-Composition-Temperature Curves of RNi ₅ (R = La, Pr, Nd, and Sm) Hydrogen Storage Materials by Computer Simulation	Vasileios Tserolas Masahiko Katagiri Hidehiro Onodera Hiroshi Ogawa
2009/11	Mater. Res. Soc. Symp. Proc., 1216 (2010) W03-01	First-Principles Calculations of Phonon and Thermodynamic Properties of Hydrogen Storage a-LaNi ₅ -H	Shigeki Saito Masahiko Katagiri Vasileios Tserolas Jun Nakamura Hidehiro Onodera Hiroshi Ogawa
2009/12	Mater. Res. Soc. Symp. Proc., 1216 (2010) W03-02	Atomistic Simulation on Hydrogen Storage in Metallic Nanoparticles	Hiroshi Ogawa Masahiko Katagiri
2010/1	Materials Research Society Symposium Proceedings, Vol. 1216E W08-05 (2010)	A Molecular-Dynamics Study on Metal-Immersed Hydrogen Fluids	Yasushi Takeuchi Masahiko Katagiri Hidehiro Onodera Hiroshi Ogawa
2010/2	Transactions of MRS-Japan(35(2), 221-226)	Thermodynamical Modeling of P-C Isotherms for Metal Hydride Materials	Vasileios Tserolas Masahiko Katagiri Hidehiro Onodera Hiroshi Ogawa

(計算科学G：東北大学金属材料研究所)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2010/5/1	"Handbook of Nanophysics" (7 volumes, 350 chapters) Taylor&Francis Publisher (CRC press)	Theories for Nanomaterials to Realize a Sustainable Future	R. V. Belosludov N. S. Venkataramanan H. Mizuseki O. S. Subbotin R. Sahara V. R. Belosludov Y. Kawazoe
2010/3/9	J. Phys. Chem. A, 114 (2010) 5049-5057	Titanium-Doped Nickel Clusters TiN _n (n = 1 - 12): Geometry, Electronic, Magnetic and Hydrogen Adsorption Properties	N. S. Venkataramanan R. Sahara H. Mizuseki Y. Kawazoe
2010/1/12	Comput. Mater. Sci., 49	Theoretical Investigation of	G. Chen

	(2010) S378-S382	Hydrogen Storage Ability of a Carbon Nanohorn	Q. Peng H. Mizuseki Y. Kawazoe
2010/2/13	Comput. Mater. Sci., 49 (2010) S263-S267	Quantum Chemical Studies on the Alkali Atom Doped Calix[4]arene as Hydrogen Storage Material	N. S. Venkataramanan R. Sahara H. Mizuseki Y. Kawazoe
2010/3/16	Comput. Mater. Sci., 49 (2010) S187-S193	Thermodynamic Phase Behavior of Binary Clathrate Hydrates: Computational Prediction	V. R. Belosludov O. S. Subbotin R.V. Belosludov H. Mizuseki Y. Kawazoe

(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
2009/12/	日本中性子科学会誌「波紋」 12月号 第19巻第3号 2009 技術ノート	GEM を用いた二次元中性子 検出器の開発	大下英敏 宇野彰二
2010/1/	日本中性子科学会誌「波紋」 1月号 第20巻第1号	高強度全散乱装置 NOVA	鈴木賢太郎
2010/3/	投稿論文 Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A	Development of a neutron detector with a GEM	大下英敏 宇野彰二 大友季哉 小池貴久 佐藤節夫 村上武 関本美知子 内田智久

平成22年度【86件（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
2011/3/15	環境エネルギー産業情報	インタビュー「高性能、低コストの水素貯蔵材料を開発」	秋葉 悦男
2010/4/1	JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C, 114(2010)6869.	Reversible vacancy formation and recovery during dehydrogenation-hydrogenation cycling of Ti-doped NaAlH ₄	榑 浩司 中村 優美子 Meredith T. KUBA Craig M. JENSEN 秋葉 悦男
2010/6/1	水素エネルギーシステム, 35(2010)57.	HYDRO-STAR（水素貯蔵材料先端基盤研究事業）の進捗状況	秋葉 悦男
2010/10/1	INORGANIC CHEMISTRY, 49(2010)8763.	Phase transformation and crystal structure of La ₂ Ni ₇ H _x studied by in situ X-ray diffraction	岩瀬謙二 榑 浩司 中村 優美子 秋葉 悦男
2010/10/1	JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS, 507(2010)399.	Effect of substitutional Mo on diffusion and site occupation of hydrogen in the BCT monohydride phase of V-H system studied by ¹ H NMR	浅野 耕太 林 繁信 中村 優美子 秋葉 悦男
2010/10/1	JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS, 507(2010)502.	Controlled shape of magnesium hydride synthesized by chemical vapor deposition	松本 愛子 秋山 友宏 中村 優美子 秋葉 悦男
2011/2/1	JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS, 509(2011)1841.	Hydrogenation properties of Ti-V-Mn alloys with a BCC structure containing high and low oxygen concentrations	中村 優美子 中村 仁 榑 浩司 浅野 耕太 秋葉 悦男
2011/3/1	MATERIALS TRANSACTIONS, 52(2011)481.	Decomposition of Magnesium Hydride Fiber Observed Using TEM and In-Situ AFM	松本 愛子 松田 潤子 中村 優美子 秋葉 悦男
2011/3/1	Journal of Alloys and Compounds,	Microstructure of Ti-V-Mn BCC alloys before and after	松田潤子 中村優美子

	509(2011)4352.	hydrogen absorption-desorption	秋葉悦男
2011/3/1	JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C, 115(2011)7723.	"Local structural evolution of mechanically alloyed Mg50Co50 from the atomic pair distribution function analysis	Hyunjeong Kim Jin Nakamura Huaiyu Shao Yumiko Nakamura Etsuo Akiba Karena Chapman Peter Chupas Thomas Proffen

(非金属系 G : 広島大学)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2010/4/	学術論文 Journal of Physical Chemistry C 114, 8668 (2010)	Hydrogen Desorption Reaction between Hydrogen-Containing Functional Groups and Lithium Hydride	H. Miyaoka T. Ichikawa H. Fujii Y. Kojima
2010/	Materials Science Forum, 654-656, 2855 (2010), proceedings	Hydrogen Exchange Effect in MgH ₂ -LiBH ₄ System	L. Zeng H. Miyaoka T. Ichikawa Y. Kojima
2010/	Materials Science Forum, 654-656, 2815 (2010), proceedings	Thermodynamic Characterization on Hydrogen Absorption and Desorption Reactions of Lithium-Silicon Alloy	K. Doi S. Hino H. Miyaoka T. Ichikawa Y. Kojima
2010/	Materials Science Forum, 654-656, 2935 (2010), proceedings	Research and Development of Nano-Composite Materials for Hydrogen Storage	Y. Kojima
2010/	Renewable energy 2010 proceedings, P-Hf-25, (2010).	Electrochemical hydrogen charge for light hydrogen storage materials	N. Hanada R. Hanawa A. Kamura H. Suzuki K. Takai T. Ichikawa Y. Kojima
2010/4/	学術論文 Chemical	Catalytic effect of ATiO ₃ (A=Sr, Ba)	B. Paik

	Communications 46, 3982-3984, (2010)	on ammonia decomposition during mechanical milling	M. Tsubota T. Ichikawa Y. Kojima
2010/7/	学術論文 The Journal of Physical Chemistry C, 114, 13132, (2010)	Superior Hydrogen Exchange Effect in MgH ₂ -LiBH ₄ System	L. Zeng H. Miyaoka T. Ichikawa Y. Kojima
2010/7/	"学術論文 Journal of Alloys and Compounds 506, 297-301 (2010)	Structural and thermal gas desorption properties of metal aluminum amides	T. Ono K. Shimoda M. Tsubota S. Hino K. Kojima T. Ichikawa Y. Kojima
2010/8/	学術論文 The Journal of Physical Chemistry C, 114, 14662-14664 (2010)	Activation of Ammonia Borane Hybridized with Alkaline-Metal Hydrides: A Low-Temperature and High-Purity Hydrogen Generation Material	Y. Zhang K. Shimoda T. Ichikawa Y. Kojima
2010/8/	学術論文 Journal of Alloys and Compounds 507, 547-550 (2010)	Anomalous Hydrogen Absorption on Non-Stoichiometric Iron-Carbon Compound	H. Miyaoka T. Ichikawa T. Fujii W. Ishida S. Isobe H. Fujii Y. Kojima
2010/9/	学 術 論 文 International Journal of Hydrogen Energy 35, 12405-12409 (2010)	Thermal Decomposition of Alkaline-Earth Metal Hydride and Ammonia Borane Composites	Y. Zhang K. Shimoda H. Miyaoka T. Ichikawa Y. Kojima
2010/7/	学術論文 Journal of Power Sources 196, 504-507 (2011)	Hydrogen Storage Properties of Lithium Silicon Alloy Synthesized by Mechanical Alloying	K. Doi S. Hino H. Miyaoka T. Ichikawa Y. Kojima
2010/8/	学術論文 Journal of	A Synthesis and characterization of	H. Miyaoka

	Alloys and Compounds 509, 719-723 (2011)	lithium-carbon compounds for hydrogen storage	W. Ishida T. Ichikawa Y. Kojima
2010/10/	学術論文 Journal of Alloys and Compounds 509S, S584-S587 (2011)	Electrochemical charge and discharge properties for the formation of magnesium and aluminum hydrides	N. Hanada A. Kamura H. Suzuki K. Takai T. Ichikawa Y. Kojima
2011/1/	学術論文 Journal of Materials Chemistry 21, 2609-2615 (2011)	Solid State NMR Study on Thermal Decomposition Pathway of Sodium Amidoborane NaNH_2BH_3	K. Shimoda Y. Zhang T. Ichikawa H. Miyaoka Y. Kojima
2011/2/	学術論文 Chinese Journal of Physics 49, 294-300 (2011)	Raman scattering of hydrogen storage material LiNH_2	A. Michigoe T. Hasegawa N. Ogita M. Udagawa M. Tsubota T. Ichikawa Y. Kojima S. Isobe
2010/12/	学術論文 The Journal of Physical Chemistry C 115 589-593 (2011)	Catalytic effect of Ti-Li-N compounds in the Li-N-H system on hydrogen desorption properties	Y.-L. Teng T. Ichikawa Y. Kojima
2011/3/	学術論文 Journal of Chemical Physics 134, 124515 (2011)	Ab initio study on the hydrogen desorption from $\text{MH}_2\text{-NH}_3$ (M = Li, Na, K) hydrogen storage systems	A. Yamane F. Shimojo K. Hoshino T. Ichikawa Y. Kojima
2010/11/	学術論文 Journal of Alloys and Compounds 509S, S891-S894 (2011)	Liquid ammonia electrolysis by platinum electrodes	B.-X. Dong T. Ichikawa N. Hanada S. Hino Y. Kojima
2011/3/	学術論文 セラミッ	NH_3 を用いた水素貯蔵・輸送	小島由継

	クス第46巻3月号		市川貴之
2011/3/	学術論文 セラミックス第46巻3月号	アンモニアボランを用いた水素貯蔵	宮岡裕樹 小島由継

(非金属系 G : 北海道大学)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2010/4/	学術論文 Materials Transaction, Vol.51, No.5 (2010) pp.1016-1019.	In-situ High-resolution TEM Observation for Decomposition of NaAlH ₄	H. Yao H. Kawasaki S. Isobe Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki
2010/6/2	学術論文 Applied Physics Letters 96, 223109(2010)	Study on reaction mechanism of dehydrogenation of magnesium hydride by in situ transmission electron microscopy	S. Isobe A. Ono H. Yao Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki
2010/6/8	学術論文 International Journal of Hydrogen Energy, 35(2010)7563-7567	Study on Decomposition Process of NaAlH ₄ by In-situ TEM	S. Isobe H. Yao Y. Wang H. Kawasaki N. Hashimoto S. Ohnuki
2010/6/	Materials Science Forum Vols. 654-656 (2010) pp. 2867-2870, proceedings	In-Situ TEM Observation for Dehydrogenation Mechanism in MgH ₂ with Catalyst	E. Morita A. Ono S. Isobe Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki
2011/3/	学術論文 International Journal of Hydrogen Energy 36, 7909-7913 (2011)	Variable Temperature Neutron Diffraction Studies of Single Crystals of LiND ₂	S. Isobe S. Ohnuki W.I.F. David M. Gutmann M.O. Jones P.P. Edwards T. Ichikawa

			Y. Kojima
--	--	--	-----------

(非金属系 G : 上智大学)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2010/	Renewable energy 2010 proceedings, P-Hf-25, (2010).	Electrochemical hydrogen charge for light hydrogen storage materials	N. Hanada R. Hanawa A. Kamura H. Suzuki K. Takai T. Ichikawa Y. Kojima
2010/11/	学術論文 Chemical Communications, 46 (2010), 3982-3984.	Hydrogen generation by elecrolysis of liquid ammonia	N. Hanada S. Hino T. Ichikawa H. Suzuki K. Takai Y. Kojima
2010/10/	学術論文 Journal of Alloys and Compounds 509S, S584-S587 (2011)	Electrochemical charge and discharge properties for the formation of magnesium and aluminum hydrides	N. Hanada A. Kamura H. Suzuki K. Takai T. Ichikawa Y. Kojima
2010/12/	学術論文 Journal of Alloys and Compounds 509S, S759-S762 (2011)	Effects of deformation on hydrogen absorption and desorption properties of titanium	H. Suzuki H Taniguchi N. Hanada K. Takai Y. 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
2010/4/23	Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 1262 (2010) W06-03.	Electronic Structure of La(Fe _{0.88} Si _{0.12}) ₁₃	N. Kamakura T. Okane Y. Takeda S. -i. Fujimori Y. Saitoh H. Yamagami

			A. Fujimori A. Fujita S. Fujieda K. Fukamichi
2010/5/1	Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 1262 (2010) W06-09.	Ultrahigh-pressure study on the magnetic state of iron hydride using an energy domain synchrotron radiation ^{57}Fe Mössbauer spectrometer	三井隆也 平尾 直久
2010/5/6	Materials Research Society Symposium Proceedings, 1262, W06-10 (6 pages) (2010)	Real-time and direct observation of hydrogen absorption dynamics for Pd nanoparticles	D. Matsumura Y. Okajima Y. Nishihata J. Mizuki
2010/5/20	高圧力の科学と技術, 20 (2010) 166	AlH_3 の実用水素貯蔵材料利用を目指した高圧研究	齋藤 寛之
2010/8/30	サイエンス&テクノロジー 一 水素製造・吸蔵・貯蔵材料と安全化	アルミニウム水素化物による水素貯蔵	池田一貴 折茂 慎一 齋藤寛之 町田晃彦 片山芳則 青木勝敏
2010/9/20	Journal of Applied Physics 108 (2010) 063516.	Hydrogen permeation pathway for the hydrogenation reaction of aluminum	齋藤寛之 町田晃彦 片山芳則 青木勝敏
2010/10/1	電気学会論文誌 C, 130(10), 1723-1729	TiAl 表面酸化のシンクロトロン放射光を用いた光電子分光研究	橋之口道宏 角本雄一 戸出真由美 J. R. Harries 岡田美智雄 寺岡有殿 笠井俊夫
2010/10/1	電気学会論文誌 C, 130(10), 1819-1820	放射光光電子分光による重水素イオン注入 V25Cr40Ti35 表面の熱変性分析	戸出真由美 J. R. Harries 寺岡有殿 角本雄一 井上敬介

			吉越章隆
2010/10/20	High Pressure Research vol.31, pp.64-47	Structural and electrical transport properties of FeHx under high pressures and low temperatures	T. Matsuoka N. Hirao Y. Ohishi K. Shimizu A. Machida K. Aoki
2010/11/3	Journal of Alloys and Compounds, 509S, S849-S852 (2011)	Fast and real-time observation of hydrogen absorption kinetics for palladium nanoparticles	D. Matsumura Y. Okajima Y. Nishihata J. Mizuki
2010/12/1	Materials Transactions, 52, 602-604 (2011)	Hydrogenation of Al ₃ Ti at High Pressure and High Temperature	齋藤 寛之 町田 晃彦 片山 芳則 青木 勝敏
2010/12/6	Appl. Surf. Sci., 257, 4257-4263	Oxidation of TiNi surface with hyperthermal oxygen molecular beams	M. Okada M. Souwa T. Kasai Y. Teraoka
2010/12/15	Materials Transactions, 52, 595 (2011)	In Situ X-ray Diffraction Measurements of Aluminum Pulverization prior to the Hydrogenation Reaction	齋藤寛之 岡島由佳 米田安宏 町田晃彦 片山芳則 青木 勝敏
2011/1/10	Physical Review B 83, 033103 (2011).	Electronic structure of lithium amide	N. Kamakura Y. Takeda Y. Saitoh H. Yamagami M. Tsubota B. Paik T. Ichikawa Y. Kojima T. Muro Y. Kato T. Kinoshita
2011/1/26	Materials Transactions, 52,	Correlation between structure of	D. Matsumura

	635-640 (2011)	titanium additives and dehydrogenation reaction of magnesium borohydride studied by continuous observation of x-ray absorption spectroscopy	T. Ohyama Y. Okajima Y. Nishihata H.-W. Li S. Orimo
2011/2/11	Physical Review B 83, 054103 (2011).	Phase separation of lanthanum hydride under high pressure	A. Machida T. Watanuki D. Kawana K. Aoki
2011/3/1	セラミックス, 46, 178 (2011)	放射光その場 X 線回折測定を利用したアルミニウム水素化物の高温高压合成研究	齋藤寛之 町田晃彦 片山芳則 青木勝敏

(材料物性 G:兵庫県立大学)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2010/6/19	Applied Surface Science 256, 7678 (2010)	Synchrotron Radiation Photoelectron Spectroscopy and Near-Edge X-Ray Absorption Fine Structure Study on Oxidative Etching of Diamond-Like Carbon Films by Hyperthermal Atomic Oxygen	M. Tagawa, K. Yokota, A. Kitamura, K. Matsumoto, A. Yoshigoe, Y. Teraoka, K. Kanda, M. Niibe
2010/6/21	Japanese Journal of Applied Physics 49, 06GH06 (2010)	Structural Changes in Diamond-Like Carbon Films Fabricated by Ga Focused-Ion-Beam-Assisted Deposition Caused by Annealing	K. Kanda, M. Okada, Y. Kang, M. Niibe, A. Wada, H. Ito, T. Suzuki, S. Matsui
2011/2/16	Transactions of Materials Research Society of Japan 36, 71 (2011)	Departure Process of Ga from DLC Films Fabricated Using Ga Focused Ion Beam Assisted Deposition by Heat Treatment	K. Kanda, M. Okada, Y. Kang, T. Suzuki, S. Matsui

(材料物性 G:神戸大学)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2010/6/19	Applied Surface Science 256, 7678 (2010)	Synchrotron Radiation Photoelectron Spectroscopy and Near-Edge X-Ray Absorption Fine Structure Study on Oxidative Etching of Diamond-Like Carbon Films by Hyperthermal Atomic Oxygen	M. Tagawa, K. Yokota, A. Kitamura, K. Matsumoto, A. Yoshigoe, Y. Teraoka, K. Kanda, M. Niibe

(材料物性 G : 大阪大学)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2010/10/1	電気学会論文誌 C, 130(10), 1723-1729	TiAl 表面酸化のシンクロトロン放射光を用いた光電子分光研究	橋之口道宏 角本雄一 戸出真由美 J. R. Harries 岡田美智雄 寺岡有殿 笠井俊夫
2010/10/20	High Pressure Research vol.31, pp.64-47	Structural and electrical transport properties of FeHx under high pressures and low temperatures	T. Matsuoka N. Hirao Y. Ohishi K. Shimizu A. Machida K. Aoki
2010/12/6	Appl. Surf. Sci., 257, 4257-4263	Oxidation of TiNi surface with hyperthermal oxygen molecular beams	M. Okada M. Souwa T. Kasai 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
2010/4/22	Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 1262 (2010) W04-02	Magnetic state in iron hydride under pressure studied by X-ray magnetic circular dichroism at the Fe K-edge	N. Ishimatsu Y. Matsushima H. Maruyama

			T. Tsumuraya T. Oguchi N. Kawamura M. Mizumaki T. Matsuoka K. Takemura
2010/5/1	Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 1262 (2010) W06-09.	Ultrahigh-pressure study on the magnetic state of iron hydride using an energy domain synchrotron radiation ^{57}Fe Mössbauer spectrometer	三井隆也 平尾 直久
2010/10/20	High Pressure Research vol.31, pp.64-47	Structural and electrical transport properties of FeH_x under high pressures and low temperatures	T. Matsuoka N. Hirao Y. Ohishi K. Shimizu A. Machida K. Aoki

(材料物性 G : 広島大学理学研究科)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2010/4/22	Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 1262 (2010) W04-02	Magnetic state in iron hydride under pressure studied by X-ray magnetic circular dichroism at the Fe K-edge	N. Ishimatsu Y. Matsushima H. Maruyama T. Tsumuraya T. Oguchi N. Kawamura M. Mizumaki T. Matsuoka K. Takemura

(材料物性 G : 東北大学)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2010/4/16	Chem. Mater., 22 , 2702–2704	Synthesis and lithium fast-ion conductivity of a new complex hydride $\text{Li}_3(\text{NH}_2)_2\text{I}$ with double-layered structure.	M. Matsuo T. Sato Y. Miura H. Oguchi Y. Zhou

			H. Maekawa H. Takamura S. Orimo
2010/5/7	J. Appl. Phys., 107 , 096104	Lithium-ion conduction in complex hydrides LiAlH ₄ and Li ₃ AlH ₆ .	H. Oguchi M. Matsuo T. Sato H. Takamura H. Maekawa H. Kuwano S. Orimo
2010/6/17	Solid State Ionics, 192 , 143-147	Room temperature lithium fast-ion conduction and phase relationship of LiI stabilized LiBH ₄ .	R. Miyazaki T. Karahashi N. Kumatani Y. Noda M. Ando H. Takamura M. Matsuo S. Orimo H. Maekawa
2010/6/25	J. Alloys and Compounds, 505 , 654–656	Nanostructure-induced hydrogenation of layered compound MgB ₂	H.-W. Li T. Matsunaga Y. Yan H. Maekawa M. Ishikiriyama S. Orimo
2010/9/10	解説記事 月刊 Material Stage 10 (2010) 63.	水素化物系リチウムイオン伝 導体の開発	高村仁
2010/10/19	Rev. Sci. Instrum., 81 (10), 104101	Development of a nuclear magnetic resonance system for in situ analysis of hydrogen storage materials under high pressures and temperatures	S. Hashimoto Y. Noda H. Maekawa H. Takamura T. Fujito J. Moriya T. Ikeda
2011/1/1	解説記事 マテリアルイ ンテグレーション (株)TIC, 24 , 22-29	水素化物系リチウムイオン伝 導体の最新研究と材料開発状 況	前川英己

2010/12/1	Materials Transactions, 52 (2011) 49 - 53.	Novel Hydrides in Li-TM Systems Synthesized by High Pressure Method (TM = Ti, Zr, Hf)	R. Kataoka T. Sato T. Kuriwa A.Kamegawa M. Okada
-----------	--	--	--

(計算科学 G : 産業技術総合研究所ナノシステム研究部門)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2010/8/	Chem. Phys. Lett., 495 (2010) 251-255.	Adsorption and diffusion of atomic hydrogen on a curved surface of microporous carbon: A theoretical study	M. Kayanuma U. Nagashima H. Nishihara T. Kyotani H. Ogawa
2011/1/	Bull. Chem. Soc. Jpn, 84 (2011) 52-57.	Theoretical study of hydrogen chemisorption to Nitrogen-Substituted graphene-like compounds	M. Kayanuma T. Ikeshoji H. Ogawa
2011/1/	Phys. Rev. B 83, (2011) 045112.	NaAlH ₄ doped with Ti or Sc: Bulk and surface investigation from first principles	Hao Wang Akinori Tezuka Hiroshi Ogawa Tamio Ikeshoji
2011/9/	J. Alloys Compds, 509 (2011) S868-871.	Nuclear quantum effect on hydrogen adsorption site of zeolite-templated carbon model using path integral molecular dynamics	K. Suzuki M. Kayanuma M. Tachikawa H. Ogawa H. Nishihara T. Kyotani U. Nagashima
2011/9/	J. Alloys Compds., 509 (2011) S675-678.	Hydrogen atom adsorption on aluminium icosahedral clusters: A DFT study	P.T.V. Bac H. Ogawa
2011/9/	J. Alloys Compds., 509 (2011) S853-856.	Simulation study of structural variation of metallic nanoparticles caused by hydrogenation	H. Ogawa
2011/1/	Mater. Trans. (2011) 614-617.	Molecular dynamics study of the particle size dependency of structural change in hydrogenated f.c.c.	H. Ogawa

		nanoparticles	
2011/3/	Computational and Theoretical Chemistry, 975 (2011) 128-133.	Path integral molecular dynamics for hydrogen adsorption site of zeolite-templated carbon with semi-empirical PM3 potential	K. Suzuki M. Kayanuma M. Tachikawa H. Ogawa H. Nishihara T. Kyotani U. Nagashima
2011/1/	MRS 2010 fall meeting proc. (2011)	Hydrogen atom adsorption on aluminium clusters: An electronic structures density functional study	P.T.V. Bac H. Ogawa
2010/10/	Renewable Energy 2010 Proc, O-Hf-3-2 (2010) 1-4	MD simulation of hydrogen absorption in metallic nanoparticles	H. Ogawa M. Katagiri

(計算科学 G : 物質・材料研究機構)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2010/10/	Renewable Energy 2010 Proceedings, O-Hf-3-2 (2010) 1-4	MD simulation of hydrogen absorption in metallic nanoparticles	Hiroshi Ogawa Masahiko Katagiri

(計算科学 G : 東北大学金属材料研究所)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2010/8/20	Chem. Phys., 377 (2010) 54-59	Theoretical Investigation on the Alkali-Metal Doped BN Fullerene as a Material for Hydrogen Storage	N. S. Venkataramanan R. V. Belosludov R. Note R. Sahara H. Mizuseki Y. Kawazoe
2010/4/21	MRS Symposium Proc. 1262(2010) W04-02	Magnetic state in iron hydride under pressure studied by X-ray magnetic circular dichroism at the Fe K-edge	N. Ishimatsu Y. Matsushima H. Maruyama T. Tsumuraya T. Oguchi N. Kawamura M. Mizumaki

			T. Matsuoka K. Takemura
2011/3/29	J. Chem. Phys. 134 (2011) 124515	Ab initio study on the hydrogen desorption from MH-NH ₃ (M=Li, Na, K) hydrogen storage system	A. Yamane F. Shimojo K. Hoshino T. Ichikawa Y. Kojima
2010/8/	水素製造・吸蔵・貯蔵材料と安全化, サイエンス&テクノロジー, pp 182-192, 2010.	スピルオーバー水素を利用した新規水素貯蔵	西原洋知 京谷隆 伊藤仁 内山誠
2010/8/	Chemical Physics Letters, 495, 251-255 (2010).	Adsorption and diffusion of atomic hydrogen on a curved surface of microporous carbon: A theoretical study	M. Kayanuma U. Nagashima H. Nishihara T. Kyotani H.Ogawa
2011/1/	Computational and Theoretical Chemistry, 975, 128-133 (2011).	Path integral molecular dynamics for hydrogen adsorption site of zeolite-templated carbon with semi-empirical PM3 potential	K. Suzuki M. Kayanuma M. Tachikawa H.Ogawa H. Nishihara T. Kyotani, U. Nagashima

(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
2010/8/30	サイエンス&テクノロジー 水素製造・吸蔵・貯蔵材料と安全化	アルミニウム水素化物による水素貯蔵	池田一貴 折茂 慎一 齋藤寛之 町田晃彦 片山芳則 青木勝敏
2011/	論文 Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A, 623, 126-128, 2010	Development of a neutron detector with a GEM	大下英敏 宇野彰二 大友季哉 小池貴久 村上武

			佐藤節夫 関本美知子 内田智久
2011/	RADIOISOTOPES, Vol.60, 35-46, 2010	J-PARC における全散乱実験の展 望（連載講座“中性子回折の基 礎と応用”）	大友季哉
2011/	論文 Materials Transactions, 52(4), 598-601, 2011	Structural and hydrogen desorption properties of aluminum hydride	池田一貴 大下英敏 金子直勝 J. Zhang 米村雅雄 大友季哉 鈴谷賢太郎 湯川宏 森永正彦 李海文 千星聡 折茂慎一
2011/	論文 セラミックス, Vol.46, 174-177, 2011	アルミニウム水素化物の合成お よび原子配置と水素放出特性	池田一貴 大友季哉 武藤俊介、 折茂慎一

平成23年度【77件（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
2011/4/1	INORGANIC CHEMISTRY, 50(2011)4548.	Synthesis and crystal structure of Pr ₅ Ni ₁₉ superlattice alloy and its hydrogen absorption-desorption property	岩瀬謙二 榑 浩司 松田 潤子 中村 優美子 石垣 徹 秋葉 悦男
2011/4/1	MATERIALS TRANSACTIONS, 52(2011)586.	"Phase transformation and lattice strain formation in Ti _{1.0} V _{1.1} Mn _{0.9} during the first absorption and desorption	山崎 幸春 中村仁 榑 浩司 中村 優美子 秋葉 悦男
2011/7/1	JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS, 509(2011)7498.	Lattice defects introduced into LaNi ₅ -based alloys during hydrogen absorption/desorption cycling	松田 潤子 中村 優美子 秋葉 悦男
2011/8/1	高圧力の科学と技術(日本高圧力学会誌), 21(2011)206	水素吸蔵合金の水素吸蔵・放出反応に伴う構造変化のその場観察	中村 優美子
2011/8/1	MRS Symposium Proceedings, 1334(2011).	Structural Studies of Hydrogen Storage Alloys using X-ray/Neutron Diffraction and Total Scattering	中村 優美子 Kim Hyunjeong 山崎 幸春 榑 浩司 Thomas Proffen 秋葉 悦男
2011/9/7	JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C	Insight into the Hydrogenation Properties of Mechanically Alloyed Mg ₅₀ Co ₅₀ from the Local Structure	Kim Hyunjeong Jin Nakamura Huaiyu Shao 中村 優美子 秋葉 悦男 Karena W. Chapman Peter J. Chupas Thomas Proffen
2011/10/1	INTERNATIONAL	Hydrogen absorption kinetics	松本 愛子

	JOURNAL OF HYDROGEN ENERGY, 36(2011)14488	of magnesium fiber prepared by vapor deposition	浅野 耕太 榭 浩司 中村 優美子
2011/11/1	APPLIED SURFACE SCIENCE, 258(2011)1456.	In situ atomic force microscopy observation of hydrogen absorption/desorption by Palladium thin film	松本 愛子 榭 浩司 中村 優美子 秋葉 悦男
受理	JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C	In-situ X-ray diffraction study of phase transformation of $Mg_{2-x}Pr_xNi_4$ during hydrogenation and dehydrogenation ($x = 0.6$ and 1.0)	榭 浩司 寺下尚克 角掛繁 中村 優美子 秋葉 悦男
投稿中	Zeitschrift Fur Kristallographie	Variation in the ratio of Mg_2Co and $MgCo_2$ like phases in mechanically alloyed Mg_xCo_{100-x} using the atomic pair distribution function analysis	Hyunjeong Kim Jin Nakamura Huaiyu Shao Yumiko Nakamura Etsuo Akiba Karena W. Chapman Peter J. Chupas Thomas Proffen
投稿中	JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS	Effect of substitutional Cr on hydrogen diffusion and thermal stability for the BCT monohydride phase of the V-H system studied by 1H NMR	浅野 耕太 林 繁信 中村 優美子 秋葉 悦男
投稿中	JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C	Reorientational Motion of BH_4 Ions in Alkali Borohydrides MBH_4 ($M = Li, Na, K$) as Studied by Solid-state NMR	治村 圭子 林 繁信
投稿予定(2 月末まで)	JOURNAL OF ALLOYS AND	Dependence of Rare earth elements and alloy	K. SAKAKI N. TERASHITA

	COMPOUNDS	composition on crystal structure of hydride in $Mg_{2-x}RE_xNi_4$	S. TSUNOKAKE Y. NAKAMURA E. AKIBA
投稿予定(2 月末まで)	JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C	Identification of vacancy formation sites in $LaNi_5Cu$ during hydrogenation using in-situ coincidence Doppler broadening technique	Kouji Sakaki Yumiko Nakamura Etsuo Akiba
投稿予定(2 月末まで)	JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C	Vacancy formation and recovery in $LaNi_{5-x}Cu$ ($x=0, 1$) during hydrogenation and dehydrogenation	Kouji Sakaki Yumiko Nakamura Etsuo Akiba
投稿予定(2 月末まで)	検討中	Probing the local, medium and long range structural order via rapid acquisition pair distribution function (RA-PDF) experiments (tentative)	Hyunjeong Kim Kouji Sakaki Yumiko Nakamura Akihiko Machida Tetsu Watanuki (tentative)
投稿予定(2 月末まで)	検討中	Phase structure and hydrogen absorbing property in the Ti-Fe-Al system	J. Matsuda Y. Nakamura E. Akiba
投稿予定(2 月末まで)	JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS	Phase structures and hydrogensites in vanadium deuterides studied by solid-state NMR	鈴木 陽 林 繁信
投稿予定(3 月以降)	検討中	Effect of heavy strain on cyclic stability of V-Ti bcc alloys from the local structural studies (tentative)	Hyunjeong Kim Kouji Sakaki Jin Nakamura Yumiko Nakamura Hiroshi Ogawa Etsuo Akiba Akihiko Machida Tetsu Watanuki Thomas Proffen (tentative)
投稿予定(3 月以降)	検討中	Hydrogen induced amorphization in $Mg_{1-x}Pr_xNi_2$	Hyunjeong Kim Kouji Sakaki

		x>0.5 Laves phase from the local structure (tentative)	Yumiko Nakamura Etsuo Akiba Naoyoshi Terashita Akihiko Machida Tetsu Watanuki Katharine Page Joan Siewenie (tentative)
投稿予定(3月以降)	検討中	Transmission electron microscopic study on Ti-V alloys after cycles of hydrogenation/dehydrogenation	J. Matsuda H. J. Kim K. Sakaki Y. Nakamura E. Akiba
受理済	Hyperfine Interactions	An in situ Mössbauer study using synchrotron radiation	増田亮 三井隆也 伊藤恵司 榊浩司 榎浩利 中村優美子 瀬戸誠
投稿予定		High speed x-ray diffraction measurements of hydrogen storage alloy on hydrogen absorption processes	K. Higuchi A. Machida Y. Katayama K. Sakaki Y. Nakamura
投稿予定	未定	Effects of substitutional Mo and Cr on site occupation and hydrogen diffusion in the beta1 phase vanadium hydride by first principles calculations	Phung T. V. Bac H. Ogawa K. Asano Y. Nakamura E. Akiba
投稿予定(3月以降)	JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C	Crystal structure and local structure analysis of Mg _{2-x} Pr _x Ni ₄ deuteride studied using neutron total scattering	K. SAKAKI N. TERASHITA H. KIM T. PROFFEN S. TSUNOKAKE Y. NAKAMURA

			E. AKIBA
投稿予定(3 月以降)	JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C	Structural degradation of $Mg_{0.8}Pr_{1.2}Ni_4$ upon hydrogenation studied using X-ray diffraction	K. SAKAKI N. TERASHITA S. TSUNOKAKE Y. NAKAMURA E. AKIBA

(金属系 G : 九州大学)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
投稿予定(3 月以降)	JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C	Transmission electron microscopic study on Ti-V alloys after cycles of hydrogenation/dehydrogenation	J. Matsuda H. J. Kim K. Sakaki Y. Nakamura E. Akiba
受理済	日本金属学会誌	超高压力下での A6061 合金の水素化反応	齋藤寛之 町田晃彦 片山芳則 青木勝敏 秋葉悦男

(非金属 G : 広島大学)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2011/5/	学術論文 The Journal of Physical Chemistry C 115, 10284-10291 (2011)	Ammonia Desorption Property and Structural Changes of $LiAl(NH_2)_4$ on Thermal Decomposition	T. Ono K. Shimoda M. Tsubota S. Kohara T. Ichikawa K. Kojima M. Tansho T. Shimizu Y. Kojima
2011/5/	学術論文 International Journal of Hydrogen Energy 36, 8217-8220 (2011)	Compressed Hydrogen Production via Reaction between Liquid Ammonia and Alkali Metal Hydride	H. Miyaoka T. Ichikawa S. Hino Y. Kojima
2011/6/	学術論文 Applied Physics Letters 99,	Identifying Catalyst in Li-N-H System by X-ray Absorption	S. Isobe S. Hino

	013101 (2011)	Spectroscopy	T. Ichikawa Y. Kojima
2011/7/	學術論文 International Journal of Hydrogen Energy 36, 12319-12323 (2011)	Correlation between Kinetics and Chemical Bonding State of Catalyst Surface in Catalyzed Magnesium Hydride	T. Ma S. Isobe E. Morita Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki T. Kimura T. Ichikawa Y. Kojima
2011/10/	學術論文 Chemical Communications 47, 12227-12229 (2011)	Improvement of hydrogen desorption kinetics in the LiH-NH ₃ system by addition of KH	Y.-L. Teng T. Ichikawa H. Miyaoka Y. Kojima
2011/10/ 印刷中	學術論文 Applied Mechanics and Materials 117-119, 1195-1198 (2012)	Improvement of Hydrogenation and Dehydrogenation Kinetics on MgH ₂ by the Catalytic Effect of ZrO ₂	L. Zeng T. Kimura S. Hino H. Miyaoka T. Ichikawa, Y. Kojima
投稿中	Physcal Review Letters	Formation of NaCl-type monodeuteride LaD by disproportionation reaction of LaD ₂	A. Machida M. Honda T. Hattori A.Sano-Furukawa T. Watanuki Y. Katayama K. Aoki K. Komatsu H. Arima H. Ohshita T. Otomo M. Tsubota K. Doi T. Ichikawa Y. Kojima D.Y. Kim

(非金属 G : 北海道大学)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2011/6/	学術論文 Applied Physics Letters 99, 013101 (2011)	Identifying Catalyst in Li-N-H System by X-ray Absorption Spectroscopy	S. Isobe S. Hino T. Ichikawa Y. Kojima
2011/7/	学術論文 International Journal of Hydrogen Energy 36, 12319-12323 (2011)	Correlation between Kinetics and Chemical Bonding State of Catalyst Surface in Catalyzed Magnesium Hydride	T. Ma S. Isobe E. Morita Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki T. Kimura T. Ichikawa Y. Kojima
2011/10/ 印刷中	学術論文 Journal of Electron Microscopy 0(0): 1-4 (2011)	Plastic Bag Method for Active Sample Loading into Transmission Electron Microscope	H. Yao S. Isobe Y. Wang 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
2010/4/6	Solid State Communications 151 , 815 (2011)	Vibrational spectroscopy studies of a pressure-induced disproportionation reaction of LaH ₂	Y. Sakurai, A. Machida, K. Aoki
2011/4/1	日本結晶成長学会誌, 38, 55 (2011)	放射光その場 X 線回折測定による高温高圧下反応の研究 - アルミニウム水素化反応の放射光その場観察	齋藤寛之, 町田晃彦, 片山芳則, 青木勝敏
2011/5/20	Japanese Journal of Applied Physics, 50 , 055801(2011).	Effect of the soft x-rays on highly hydrogenated diamond-like carbon films	K. Kanda, K. Yokota, M. Tagawa, M. Tode, Y. Teraoka, S. Matsui
2011/7/5	Physical Review Letters	Structural and valence change of	T. Matsuoka, H.

	Vol. 107 (2011) p. 025501	Europium hydride induced by application of high-pressure H ₂	Fujihisa, N. Hirao, Y. Ohishi, T. Mitsui, R. Masuda, M. Seto , T. Yoda, K. Shimizu, A. Machida, K. Aoki
2011/8/20	高圧力の科学と技術 21 , 168 (2011)	希土類金属 2 水素化物の圧力誘起相分離	町田晃彦, 綿貫徹、, 青木勝敏
2011/8/20	高圧力の科学と技術 21 , 184 (2011)	高圧力下における希土類水素化物のラマン散乱および可視紫外吸収分光	久米徹二、町田晃彦、青木勝敏、佐々木重雄、清水宏晏
2011/8/20	高圧力の科学と技術 21 , 190 (2011).	高圧水素中における金属水素化物の電気抵抗測定技術及び鉄水素化物の電気伝導性と結晶構造	松岡岳洋, 平尾直久, 大石泰生, 清水克哉, 町田晃彦, 青木勝敏
2011/8/31	Physical Review B Vol.84 064132-1 -7	High-pressure study of ScH ₃ : Raman, infrared, and visible absorption spectroscopy	T. Kume, H. Ohura, T. Takeichi, A. Ohmura, A. Machida, T. Watanuki, K. Aoki, S. Sasaki, H. Shimizu, K. Takemura
2011/10/1	Physical Review B 84 , 153102 (2011).	Electronic structure of aluminium trihydride studied using soft x-ray emission and absorption spectroscopy	Y. Takeda, Y. Saitoh, H. Saitoh, A. Machida, K. Aoki, H. Yamagami, T. Muro, Y. Kato, T. Kinoshita, ,
2011/12/7	Hyperfine Interactions 204, 97 (2012).	Synchrotron Radiation ⁵⁷ Fe-Mössbauer spectroscopy using Nuclear Monochromator	三井隆也, 増田亮, 平尾直久, 壬生攻, 瀬戸誠
2012/1/3	Hyperfine Interactions 204,	An in situ Mössbauer study using	増田亮, 三井隆

	139 (2012)	synchrotron radiation	也, 伊藤恵司, 榊浩司, 榎木浩 利, 中村優美子, 瀬戸誠
2012/2/1	日本金属学会誌 76, 139 (2012)	超高压力下での A6061 合金の 水素化反応	齋藤寛之, 町田 晃彦, 片山芳則, 青木勝敏, 秋葉 悦男
2012/2/23	Appl. Phys. Express 5, 031802 (2012)	A chemical-state specific study of the composition of the natural oxide layer of $V_{25}Cr_{40}Ti_{35}$	J. R. Harries, Y. Teraoka, M. Tode, A. Yoshigoe
2012/2/24	Journal of Physical Society of Japan 81 , 034714 (2012)	Mössbauer study on the $SmFe_2$ hydride through ^{149}Sm and ^{57}Fe	増田亮, 三井隆 也, 伊藤恵司, 小林康浩, 北尾 真司, 瀬戸誠
2012/5/14	Physical Review Letters 108, 205501 (2012).	Formation of NaCl-type monodeuteride LaD by disproportionation reaction of LaD_2	A. Machida, M. Honda, T. Hattori, A. Sano-Furukawa, T. Watanuki, Y. Katayama, K. Aoki, K. Komatsu, H. Arima, H. Ohshita, K. Ikeda, K. Suzuya, T. Otomo, M. Tsubota, K. Doi, T. Ichikawa, Y. Kojima, D.Y. Kim
2012/8/31 発刊予定	Astrophysics and Space Science Proceedings	Hydrogen removal from hydrogenated diamond-like carbon films by photon and energetic atomic oxygen beam exposures	K. Yokota, M. Tagawa, K. Matsumoto, Y. Furuyama, A. Kitamura, K. Kanda, M. Tode, A. Yoshigoe, Y.

			Teraoka
投稿中		Particle size dependence of hydrogen absorption kinetics for palladium nanoparticles	D. Matsumura, Y. Okajima, Y. Nishihata, J. Mizuki
投稿予定		Diffusion coefficient of hydrogen in AlH ₃	齋藤寛之, 池田一貴, 町田晃彦, 片山芳則, 青木勝敏, 折茂 慎一
投稿予定		Phase relationship of TiH ₂ at high pressures and high temperatures	遠藤成輝, 齋藤寛之, 町田晃彦, 片山芳則, 青木勝敏
投稿予定		High speed x-ray diffraction measurements of hydrogen storage alloy on hydrogen absorption processes	K. Higuchi, A. Machida, Y. Katayama, K. Sakaki, Y. Nakamura
投稿予定	Appl. Surf. Sci.	Role of native oxide layer for D ₂ desorption from V single crystals	Y. Teraoka, M. Tode, J. R. Harries, A. Yoshigoe
投稿予定		High-pressure phase transition of LaH ₃ studied by XRD, Raman, visible absorption spectroscopy	T. Kume, T. Nakamoto, A. Machida, T. Watanuki, K. Aoki, S. Sasaki, H. Shimizu, K. Takemura

(材料物性 G : 兵庫県立大学)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2011/5/20	Japanese Journal of Applied Physics, 50, 055801 (2011).	Effect of the soft x-rays on highly hydrogenated diamond-like carbon films	K. Kanda K. Yokota M. Tagawa M. Tode Y. Teraoka

			S. Matsui
2012/8/31 発刊予定	Astrophysics and Space Science Proceedings	Hydrogen removal from hydrogenated diamond-like carbon films by photon and energetic atomic oxygen beam exposures	K. Yokota M. Tagawa K. Matsumoto Y. Furuyama A. Kitamura K. Kanda M. Tode A. Yoshigoe Y. Teraoka

(材料物性 G : 神戸大学)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2011/5/20	Japanese Journal of Applied Physics, 50, 055801 (2011).	Effect of the soft x-rays on highly hydrogenated diamond-like carbon films	K. Kanda K. Yokota M. Tagawa M. Tode Y. Teraoka S. Matsui
2012/8/31 発刊予定	Astrophysics and Space Science Proceedings	Hydrogen removal from hydrogenated diamond-like carbon films by photon and energetic atomic oxygen beam exposures	K. Yokota M. Tagawa K. Matsumoto Y. Furuyama A. Kitamura K. Kanda M. Tode A. Yoshigoe Y. Teraoka

(材料物性 G : 大阪大学)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2011/7/5	Physical Review Letters Vol. 107 (2011) p. 025501	Structural and valence change of Europium hydride induced by application of high-pressure H ₂	T. Matsuoka H. Fujihisa N. Hirao Y. Ohishi T. Mitsui R. Masuda

			M. Seto T. Yoda K. Shimizu A. Machida K. Aoki
2011/8/20	「高圧力の科学と技術」, 第21巻-第3号 pp.190-196, (2011).	高圧水素中における金属 水素化物の電気抵抗測定 技術及び鉄水素化物の電 気伝導性と結晶構造	松岡岳洋 平尾直久 大石泰生 清水克哉 町田晃彦 青木勝敏
2011/10/20	Review of Scientific Instruments 82, 105109 (2011)	Cryogenic implementation of charging diamond anvil cells with H ₂ and D ₂	Z. Chi H. Nguyen T. Matsuoka T. Kagayama N. Hirao Y. Ohishi K. Shimizu

(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
2011/7/5	Physical Review Letters Vol. 107 (2011) p. 025501	Structural and Valence Changes of Europium Hydride Induced by Application of High-Pressure H ₂	T. Matsuoka H. Fujihisa N. Hirao Y. Ohishi T. Mitsui R. Masuda M. Seto T. Yoda K. Shimizu A. Machida K. Aoki
2011/8/20	「高圧力の科学と技 術」, 第 21 巻-第 3 号 pp.190-196, (2011).	高圧水素中における金属水素 化物の電気抵抗測定技術及び 鉄水素化物の電気伝導性と結 晶構造	松岡岳洋 平尾直久 大石泰生 清水克哉 町田晃彦

			青木勝敏
2011/10/20	Review of Scientific Instruments 82, 105109 (2011)	Cryogenic implementation of charging diamond anvil cells with H ₂ and D ₂	Z. Chi H. Nguyen T. Matsuoka T. Kagayama N. Hirao Y. Ohishi K. Shimizu
2011/12/7	Hyperfine Interactions 204, 97 (2012).	Synchrotron Radiation ⁵⁷ Fe-Mössbauer spectroscopy using Nuclear Monochromator	三井隆也 増田亮 平尾直久 壬生攻 瀬戸誠

(材料物性 G : 広島大学理学研究科)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2011/8/20	「高圧力の科学と技術」, 第 21 巻, 第 3 号 pp.176-183, (2011).	X線磁気円二色性でみる 3d 遷移金属水素化物の磁気状態	石松直樹
投稿中	Physical Review B	Hydrogen-induced modification to the electronic structure and magnetic states of Fe, Co, and Ni monohydrides	N. Ishimatsu T. Shichijo Y. Matsushima H Maruyama Y Matsuura T. Tsumuraya T. Shishidou T. Oguchi N. Kawamura M. Mizumaki T. Matsuoka K. Takemura

(材料物性 G : 岐阜大学)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2011/8/20	「高圧力の科学と技術」, 第 21 巻, 第 3 号 pp.184-189, (2011).	高圧力下における希土類水素化物のラマン散乱および可視紫外吸収分光	久米徹二 町田晃彦 青木勝敏

			佐々木重雄 清水宏晏
2011/8/31	Physical Review B Vol.84 064132-1 -7	High-pressure study of ScH ₃ : Raman, infrared, and visible absorption spectroscopy	T. Kume H. Ohura T. Takeichi A. Ohmura A. Machida T. Watanuki K. Aoki S. Sasaki H. Shimizu K. Takemura
投稿予定		High-pressure phase transition of LaH ₃ studied by XRD, Raman, visible absorption spectroscopy	T. Kume T. Nakamoto A. Machida T. Watanuki K. Aoki S. Sasaki H. Shimizu K. Takemura

(材料物性 G : 東北大学)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2011/4/1	Mater. Trans., 52 , 654-657	Enhanced Electrical Conductivities of Complex Hydrides Li ₂ (BH ₄)(NH ₂) and Li ₄ (BH ₄)(NH ₂) ₃ by Melting	Y. Zhou M. Matsuo Y. Miura H. Takamura H. Maekawa A. Remhof A. Borgschulte A. Zuttel T. Otomo S. Orimo
2011/5/25	Mater. Trans., 52 , 1443-1446	Formation Process of [B ₁₂ H ₁₂] ²⁻ from [BH ₄] ⁻ during the Dehydriding Reaction of Mg(BH ₄) ₂	Y. Yan H-W. Li H. Maekawa M. Aoki

			T. Noritake M. Matsumoto K. Miwa S. Towata S. Orimo
2011/7/1	解説記事 Electrochemistry(電気化学および工業物理化学), 79(8), 625-630	錯体水素化物を用いた新規リチウムイオン伝導体群	前川英己

(計算科学 G : 産業技術総合研究所ナノシステム研究部門)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2011/9/	J. Appl. Phys., 110, 063533 (2011)	Hydrogen quantum effects in hydride LaNi_5H_7	Tomoaki Kaneko Akinori Teduka Hiroshi Ogawa Tamio Ikeshoji
2011/9/	Theoretical Chemistry Accounts, 130, 1039 (2011)	Isotope effect of proton and deuteron adsorption site on zeolite-templated carbon using path integral molecular dynamics	K. Suzuki M. Tachikawa H. Ogawa S. Ittisanronnachai H. Nishihara T. Kyotani U. Nagashima
2011/9/	MRS 2011 Spring meeting proc. (2011) S11-1334-N03-15	Classical MD Simulation of Hydrogen Absorption in f.c.c. and b.c.c. Nanoparticles	H. Ogawa P.T.V. Bac
2011/9/	Journal of Alloys and Compounds, 509S, S868-S871 (2011).	Nuclear quantum effect on hydrogen adsorption site of zeolite-templated carbon model using path integral molecular dynamics	K. Suzuki M. Kayanuma M. Tachikawa H. Ogawa H. Nishihara T. Kyotani U. Nagashima
2011/	Theoretical Chemistry Accounts, 印刷中	H/D Isotope effect of hydrogen adsorption site on zeolite-templated carbon using path integral molecular dynamics	K. Suzuki M. Tachikawa H. Ogawa S Ittisanronnachai H. Nishihara

			T. Kyotani U. Nagashima
投稿予定	未定	Temperature dependence of H/D isotope effect on adsorption site for zeolite-templated carbon.	S. Ittisanronnachai K. Suzuki M. Tachikawa H. Ogawa H. Nishihara T. Kyotani U. Nagashima
投稿予定	未定	Effects of substitutional Mo and Cr on site occupation and hydrogen diffusion in the beta1 phase vanadium hydride by first principles calculations	Phung T. V. Bac H. Ogawa K. Asano Y. Nakamura E. Akiba

(計算科学 G : 東北大学金属材料研究所)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2011/4/1	ナノ学会会報	大規模シミュレーション計算による材料科学	佐原亮二 水関博志 川添良幸
2011/11/1	Handbook on Fullerene, Synthesis, Properties and Applications, Edited by R. F. Verner and C. Benvegna, Nova Science Pub. Inc.	Functionalized Nanofullerenes for Hydrogen Storage: A Theoretical Perspective	N. S. Venkataramanan A. Suvitha H. Mizuseki Y. Kawazoe

(計算科学 G : 広島大学大学院総合科学研究科)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2011/9/	J. Alloys Compd. 509 (2011) S728	Cluster size effect on hydrogen desorption process from $\text{Li}_n\text{H}_n\text{-NH}_3$ hydrogen storage system	A. Yamane F. Shimojo K. Hoshino T. Ichikawa Y. Kojima
投稿準備中	Phys. Rev. B	First-principles study on the structural and magnetic properties of iron hydride	T. Tsumuraya Y. Matsuura T. Shishidou

			T. Oguchi
投稿準備中	Phys. Rev. B	Hydrogen-induced modification to the electronic structure and magnetic states of Fe, Co, and Ni hydrides	N. Ishimatsu T. Shichijo Y. Matsushima H. Maruyama Y. Matsuura T. Tsumuraya T. Shishidou T. Oguchi N. Kawamura M. Mizumaki T. Matsuoka

(計算科学 G : 東北大学多元物質科学研究所)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2011/9/	Journal of Alloys and Compounds, 509S, S868-S871 (2011).	Nuclear quantum effect on hydrogen adsorption site of zeolite-templated carbon model using path integral molecular dynamics	K. Suzuki M. Kayanuma M. Tachikawa H.Ogawa H. Nishihara T. Kyotani U. Nagashima
2011/	Theoretical Chemistry Accounts, 印刷中	H/D Isotope effect of hydrogen adsorption site on zeolite-templated carbon using path integral molecular dynamics	K. Suzuki M. Tachikawa H.Ogawa S Ittisanronnachai H. Nishihara T. Kyotani U. Nagashima

(計算科学 G : 大阪大学産業科学研究所)

掲載日	掲載誌	タイトル	著者
2011/11/2	Appl. Phys. Lett. 99, 181904 (2011).	Role of van der Waals interaction in crystalline ammonia borane	K. Yamauchi I. Hamada H. B. Huang T. Oguchi
投稿準備中	J. Phys. Soc. Jpn.	First-Principles Study of Ammonia	H. B. Huang

		Borane and Alkali-Metal Amidoboranes for Hydrogen Storage	K. Yamauchi T. Tsumuraya T. Shishidou T. Oguchi
投稿予定		Hydrogen-induced modification to the electronic structure and magnetic states of Fe, Co, and Ni monohydrides	N. Ishimatsu T. Shichijo Y. Matsushima H Maruyama Y Matsuura T. Tsumuraya T. Shishidou T. Oguchi N. Kawamura M. Mizumaki T. Matsuoka K. Takemura
投稿準備中	Phys. Rev. B	First-principles study on the structural and magnetic properties of iron hydride	T. Tsumuraya Y. Matsuura T. Shishidou T. Oguchi

(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
2011/	投稿論文 (査読中) Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A	Stability of neutron beam monitor for High Intensity Total Diffractometer at J-PARC	大下英敏 大友季哉 宇野彰二 池田一貴 内田智久 金子直勝 小池貴久 庄子正剛 鈴谷賢太郎 瀬谷智洋 坪田雅己
2011/	投稿論文 Journal of Physical Chemistry C, 115, 10284-10291, (2011)	Ammonia Desorption Property and Structural Changes of LiAl(NH ₂) ₄ on Thermal	小野泰輔 下田景士 坪田雅己

		Decomposition	小原真司 市川貴之 小島健一 丹所正孝 清水禎 小島由継
2011/4/1	Mater. Trans., 52 , 654-657	Enhanced Electrical Conductivities of Complex Hydrides $\text{Li}_2(\text{BH}_4)(\text{NH}_2)$ and $\text{Li}_4(\text{BH}_4)(\text{NH}_2)_3$ by Melting	Y. Zhou M. Matsuo Y. Miura H. Takamura H. Maekawa A. Remhof A. Borgschulte A. Zuttel T. Otomo S. Orimo
投稿予定	投稿論文 Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A	High Intensity Total Diffatometer (NOVA) at J-PARC	大下英敏 大友季哉 池田一貴 金子直勝 坪田雅己 瀬谷智洋 鈴谷賢太郎
投稿中	Physcal Review Letters	Formation of NaCl-type monodeuteride LaD by disproportionation reaction of LaD_2	A. Machida M. Honda T. Hattori A.Sano-Furukawa T. Watanuki Y. Katayama K. Aoki K. Komatsu H. Arima H. Ohshita T. Otomo M. Tsubota K. Doi T. Ichikawa

			Y. Kojima D. Y. Kim
--	--	--	------------------------

口頭発表・ポスター発表・講演【全 1252 件】 平成 19 年度【77 件】

(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} D _x 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	榊 浩司 Meredith T. KUBA 中村 優美子

		の影響	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 La(Ni _{5-x} 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 第2回 会合 講演	材料分野から J-PARC へ の期待	秋葉 悦男
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	Introduction of Fundamental Research on	秋葉 悦男

	講演	Hydrogen Storage Materials (HYDRO ☆ STAR)	
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	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

	季大会		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.	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 第 48 回高圧討論会	YH ₂ の圧力誘起分解現象	町田 晃彦 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（招待講演） 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（招待講演） 「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压振動 分光による水素のふるまい と高压相転移	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	高压合成された 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	高压合成された 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-Cubi c))	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	R. Belosludov O. Subbotin

		Clathrate Hydrate: Theoretical Aspects of Energy Storage Application	H. Mizuseki 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 Hydrate: Application for Hydrogen Storage	R. Belosludov 水関 博志 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【268件】

(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 榑 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)	榑 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-V0.9Mo0.1Hx 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	Ti45Cr25Mo30 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 LiHComposites	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)	$\text{ScH}_2\text{-MB}_n$ 混合物 ($M=\text{Mg},$ 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	ミリング処理したアルカリ 金属水素化物の X 線を	中村 耕生 市川 貴之

	(熊本大学)	用いた分析	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リゼーション	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 磯部 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 Agency Hydrogen Implementing Agreement Expert Meeting of	Basic research of nano-composite materials for hydrogen storage	Y. Kojima

	Hydrogen Storage - Task 22 (Roma), Italy		
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 HydrogenStorage	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 (Singapore)	Factors Controlling Reactivity of Ammonia and Metal Hydrides	K. Tange H. Yamamoto 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 (宮古島)	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 市川 貴之 小島 健一 小島 由継
2008/11/29	口頭発表	水素エネルギー社会の構	小島 由継

	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)	築を目指して～水素貯蔵技術の現状と展望～	
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 (タワーホール船堀、東京)	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 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 (HESS)大会 (タワーホール 船堀、東京)	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 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	高純度 MH (M=Li, Na, K)の 合成	山本 ひかる 宮岡 裕樹

	(HESS)大会 (タワーホール船堀、東京)		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 (Hiroshima University)	X-ray photoelectron spectroscopy for mechanically treated lithium hydride	K. Nakamura M. Tsubota M. Nakatake S. Hino 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(NH ₂) _x ; M = 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	Mg-C 複合物質の水素貯蔵	久保田 光

	日本金属学会 2008 春期大会 (東京工業大学)	特性評価	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 Calcium 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 (東京工業大学)	核磁気共鳴法を用いた Sc-M-B-H 系水素貯蔵物質 ($M=\text{Mg}, \text{Ca}$)のキャラクタ リゼーション	中川 鉄水 市川 貴之 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	X 線光電子分光による LiH の表面分析方法の確	中村 耕生 坪田 雅己

	(東京工業大学)	立	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 譲 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

2009/1/22-1/23	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 分解ナノ構造変化	川崎 洋 須田 孝徳 橋本 直幸 大貫 惣明
2009/2/25-2/26	口頭発表 JAEA-Symposium on Synchrotron Radiation Research, Hyogo	Microscopic Reaction Mechanism of Hydrogen Storage Materials by TEM	S. Isobe Y. Wang A. Ono H. Hirasawa Y. Hao N. Hashimoto S. Ohnuki T. Ichikaw Y. Kojima

(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 Metal-Hydrogen Systems 2008 (MH2008)	Instability of cubic-YH ₂ at high pressure	町田 晃彦 綿貫 徹 青木 勝敏
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 Storage & Fuel Cell Workshop)	High-Pressure Studies of Metal Hydrides using Synchrotron Radiation X-rays at SPring-8	町田 晃彦
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 Surface Sciences Conference of Asia and Australia (VASSCAA-4)	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
2008/10/28	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
2008/11/12	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 (招待講演) 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 (招待講演) 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 —粉末中性子回折実験—	深澤 裕
2009/1/7	ポスター発表 SPring-8 利用者懇談会	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

	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		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 (VI)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	Graphitization of thin films	神田 一浩

	2nd International Conference on New Diamond and Nano Carbons (NDNC2008)	formed by focused-ion-beam chemical-vapor-deposition	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 第69回応用物理学会学術講演会	FIB-CVD 法で形成された DLC 薄膜のアニールによる局所構造変化	神田 一浩 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	軟 X 線照射による水素化 DLC	神田 一浩

	理学関係連合講演会	膜の改質	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 Dynamics 2008	Chemical reactions dynamics: From atomic level to global view	M. Okada H. Ito K. Moritani Y. Teraoka
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 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

(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	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

	講演会		橋本 真一 松尾 元彰 折茂 慎一
2008/11/12-14	ポスター発表 第47回 NMR 討論会	水素貯蔵材料評価用高温・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
2009/3/10	口頭発表 ECI:Nonstoichiometric 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	Simulation Studies on Hydrogen Storage Processes in the Hydro-star Project	H. Ogawa

	Workshop on Fuel Cell Performance Improvement & Hydrogen Storage 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)	Electronic and Crystal Structural Changes in BCC Type Hydrogen Storage Materials	Y. Tanaka M. Katagiri H. Onodera H. Ogawa

	(Singapore)		
2008/11/6	口頭発表 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	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	Structural Stability by Hydrogenation in Hydrogen Storage Materials	M. Katagiri H. Onodera H. Ogawa

	(Nagoya)		
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-Temperature 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 (つくば)	Computer simulation studies on hydrogen storage materials in the Hydro-Star project	H. Ogawa
2009/3/29	口頭発表 日本金属学会 2009年春期	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	小川 浩 手塚 明則

	大会（東京）	挙動の解析	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	Parameter Physics on the Hydrogen Diffusion into Metallic	H.Ogawa A.Tezuka

	on Metal-Hydrogen Systems (MH2008), Reykjavík, Iceland	Nanoparticles by MD Simulation	H. Wang T.Ikeshoji M.Katagiri
2008/6/24	ポスター発表 2008 International Symposium on Metal-Hydrogen Systems (MH2008), Reykjavík, 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), Reykjavík, 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-Temperature 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 on Nanoscience and Nanotechnology (AsiaNANO 2008), Singapore	Molecular Dynamics Study of Structural Stability of Hydrogen Storage	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	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

	ス		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	R.Sahara B.Tsuchiya

		Properties in Metal Hydrides	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.Sluite 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.Sluite 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 大会	第一原理計算プログラムパッ ケージ TOMBO を用いた水素 吸蔵材料に対する全電子混合 基底計算	亀卦 川理 佐原 亮二 水関 博志 大野 かおる M.Sluite 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	R.Sahara M.Iwamoto O.Kikegawa

		of Hydrogen Storage Materials	B.Saeed R.Note H.Mizuseki M.Sluiteer 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 藏材料の提案	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	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	大友 季哉

	ーラム	基盤研究展開	
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

	会		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【374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	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	HYDROGEN SYMPOSIUM 2009 講演	Hydrogen and Storage Experience and Future	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
2009/5/6	International Conference on Neutron Scattering 2009 ポスター発表	Understanding hydrogen storage properties of Mg _{0.5} Co _{0.5} alloys prepared by ball milling method from the atomic pair distribution function analysis	Hyunjeong Kim , Thomas Proffen , Peter Chupas, 中村 仁、中村 優美子、Huaiyu Shao
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	LaNi5 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	産業技術総合研究所シンポジウム「新エネルギー自動車の開発と期待される関連技術」 講演	自動車への水素搭載技術の現状と展望	秋葉 悦男
2009/7/2	NEDO 燃料電池・水素技術開発平成 20 年度成果報告シンポジウム 講演	水素貯蔵材料先端基盤研究	秋葉 悦男
2009/7/12	Gordon Research Conference Hydrogen-Metal Systems 講演	Material Research and System Development in Japan	秋葉 悦男
2009/7/14	Gordon Research Conferences ポスター発表	Observation of Lattice Defect in Hydrogenation of LaNi5-based Alloys using In-situ Positron Lifetime and Coincidence Doppler Broadening Measurements	榑 浩司、中村 優美子、秋葉 悦男
2009/7/15	Gordon Research Conference, Hydrogen-Metal Systems ポスター発表	Crystal and Local structures of (Mg,Ca)Ni ₂ D _x	中村 優美子、中村 仁、秋葉 悦男寺下 尚 克、 Bjorn Hauback,Hyunjeong Kim,Thomas Proffe
2009/8/3	International Conference on Sustainable & Green Chemistry (ICGSC) 2009 講演	Metal hydrides for hydrogen storage	中村 優美子
2009/8/20	材料における水素有効利用研究会 講演	(Mg,Pr)Ni ₂ 系ラーベス相の水素吸蔵・放出特性	寺下尚克、角掛繁、榑 浩司、中村 優

			美子、秋葉 悦男
2009/8/21	材料における水素有効利用研究会平成 21 年度 講演	HYDRO☆STAR プロジェクトの成果と展望	秋葉 悦男
2009/8/24	第 5 回国際燃料電池ワークショップ 2009 講演	Hydrogen Storage Materials: Present and Future	秋葉 悦男
2009/9/3	第 2 回「高度人材育成コース」 講演	水素貯蔵材料研究の最前線	秋葉 悦男
2009/9/16	日本金属学会 2009 年 秋期大会 講演	Ti-V-Mn 系 BCC 固溶体合金水素化物の TEM 観察	松田 潤子、中村 仁、浅野 耕太、中村 優美子、秋葉 悦男
2009/9/16	日本金属学会 2009 年 秋期大会 講演	走査型プローブ顕微鏡による Pd 薄膜の水素吸蔵その場観察	齊田 愛子 榊 浩司、中村 優美子、秋葉 悦男
2009/9/16	日本金属学会 2009 年 秋期大会 講演	REMgNi ₄ 系 C15b 型ラーベス相の水素化特性 (RE=La, Ce, Pr, Nd, Sm, Gd)	寺下尚克、角掛繁、榊 浩司、中村 優美子、秋葉 悦男
2009/9/17	日本金属学会 2009 年 秋期大会 講演	In-situ 同時計数ドップラー幅広がり(CDB)法による LaNi ₅ 系合金の格子欠陥周りの局所構造解析	榊 浩司、中村 優美子、秋葉 悦男
2009/9/17	日本金属学会 2009 年 秋期大会 講演	Ti-V-Mn 系 BCC 合金の水素化物の生成と水素の拡散におよぼす Mo 添加の影響	浅野耕太、林繁信、中村優美子、秋葉 悦男
2009/10/26	The 3rd Asia-Pacific NMR Symposium (3rd APNMR) ポスター発表	Phase structures and states of deuterium in vanadium deuterides	鈴木 陽、林 繁信
2009/10/28	II International Conference "Hydrogen Storage Technologies" 講演	Recent Progress in Research and Development of Hydrogen Storage Materials in Japan; Fundamental Research to Practical Application	秋葉 悦男
2009/11/10	第 48 回 NMR 討論会 ポスター発表	バナジウム重水素化物の相構造および重水素の存在状態	鈴木 陽、林 繁信
2009/11/10	Advanced science	Observation of Lattice Defect in	榊 浩司、中村 優

	research symposium 2009 講演	Hydrogenation of LaNi ₅ -based Alloys using In-situ Positron Annihilation Measurements	美子、秋葉 悦男
2009/11/14	The 4th Hiroshima Workshop on Sustainable Materials Science 講演	Crystal Structures and Hydrogen Absorbing Properties of (La, Mg)(Ni, Co) _{3+x} “Superlattice” Alloys	秋葉 悦男、中村 仁、岩瀬 謙二、Chai Yujun, 榎 浩利、榊 浩司、浅野 耕太
2009/12/1	MRS 2009 Fall meeting 講演	Structural and hydrogenation properties of hydrogen storage alloys	中村 優美子、中村 仁、岩瀬 謙二、松田 潤子、榊 浩司、秋葉 悦男
2009/12/1	MRS 2009 Fall meeting 講演	Local Structure Analysis in LaNi ₅ Based Alloys by In-Situ Coincidence Doppler Broadening Measurement	榊 浩司、中村 優美子、秋葉 悦男
2009/12/2	MRS 2009 fall meeting ポスター発表	Lattice defects introduced during hydrogen absorption-desorption cycles in LaNi ₅ -based alloys	松田 潤子、中村 優美子、秋葉 悦男
2009/12/2	MRS 2009 fall meeting ポスター発表	Observation of hydrogen absorption by Pd thin film using In situ scanning probe microscopy	松本 愛子、榊 浩司、中村 優美子、秋葉 悦男
2009/12/4	4thNEDO-AIST-LANL Workshop on Hydrogen Storage 講演	Overview of History and Current NEDO/AIST-LANL Workshops in Hydrogen	秋葉 悦男
2009/12/4	4th NEDO-AIST-LANL Workshop on Hydrogen Storage 講演	Characterization of metal hydrides for hydrogen storage using X-ray/neutron diffraction	中村 優美子、中村 仁、榊 浩司、秋葉 悦男 Hyunjeong Kim、Thomas Proffen
2010/2/8	2010 新春講演会 講演	これからの水素エネルギー社会	秋葉 悦男
2010/2/22	LANL-AIST-NEDO workshop on Neutron Total Scattering 講演	Structural studies of hydrogen storage materials	中村 優美子
2010/2/25	5th JAEA Synchrotron	Using X-ray and neutron total	Thomas

	Research Symposium ポスター発表	scattering to unravel the local structure of metal hydrides	Proffen,Hyunjeong Kim,中村 仁、中村 優美子、秋葉 悦男
2010/2/25	第5回JAEAシンポジ ウム ポスター発 表	Formation of lattice defects by hydrogen absorption and their thermal stability in Ti-Cr-Mo alloy	榑 浩司、中村 優 美子、秋葉 悦男
2010/2/25	第5回JAEAシンポジ ウム ポスター発 表	Crystal and Local structures of (Mg,Ca)Ni ₂ D _x	中村 優美子、秋葉 悦男、寺下尚克、 Bjorn Hauback, Thomas Proffen
2010/3/1	国際水素貯蔵フォー ラム 2010 講演	日本の水素貯蔵材料研究開発状 況	秋葉 悦男
2010/3/2	The 5th Japan-China Seminar on Hydrogen Storage Materials 講 演	Hydrogen Storage in Japan	秋葉 悦男
2010/3/2	The 5th China-Japan Seminar on Hydrogen Storage Materials ポ スター発表	Microstructure evolution of Ti-V-Mn BCC alloys before and after hydrogen absorption-desorption cycles	松田 潤子、浅野 耕太、中村 優美 子、秋葉 悦男
2010/3/26	日本化学会第90春 季年会 講演	固体 NMR を用いたバナジウム 重水素化物の相構造の研究	鈴木 陽、林 繁 信
2010/3/27	NEDO 水素貯蔵材料 関連プロジェクト連 携成果報告会 ポス ター発表	陽電子消滅法による水素吸蔵合 金の欠陥構造解析	榑浩司、中村優美 子、秋葉悦男
2010/3/27	NEDO 水素貯蔵材料 関連プロジェクト連 携成果報告会 講演	水素貯蔵材料先端基盤研究事業 について	秋葉 悦男
2010/3/27	NEDO 水素貯蔵材料 関連プロジェクト連 携成果報告会 講演	X線・中性子を用いたラーベス相 水素吸蔵材料の構造解析	榑 浩司、中村 優 美子、秋葉 悦男、 寺下尚克、角掛繁
2010/3/27	NEDO 水素貯蔵材料 関連プロジェクト連 携成果報告会 ポス ター発表	Ti-V-Mn 系 BCC 固溶体合金の水 素吸蔵放出特性と組織変化	松田 潤子、浅野 耕太、中村優美子、 秋葉悦男
2010/3/28	日本金属学会 2010 年	MgH ₂ の気相合成と水素吸蔵放	松本 愛子、 秋山

	春期大会 講演	出特性	友宏、中村 優美子、秋葉 悦男
2010/3/29	日本金属学会 2010 年春期大会 講演	Ti-V-Mn 系 BCC 固溶体合金組成と水素吸蔵放出特性および組織変化の関係	松田 潤子、浅野 耕太、中村 優美子、秋葉 悦男
2010/3/29	日本金属学会 2010 年春期大会 講演	Ti-Fe-Al 系合金の作製と水素吸蔵放出特性	松田 潤子、中村 優美子、秋葉 悦男
2010/3/29	日本金属学会 2010 年春期大会 講演	In-Situ XRD 測定による Mg _{2-x} Re _x Ni ₄ 系 (Re=La, Pr, Nd)C15b ラーベス相合金の結晶構造変化の解析	榊 浩司、寺下尚克、角掛繁、中村 優美子、秋葉 悦男
2010/3/29	日本金属学会 2010 年春期大会 講演	V-H 系 BCT 水素化物中の水素の拡散に及ぼす Mo 添加の影響	浅野耕太、林繁信、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
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, T. Ichikawa
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 Solid-State Hydrogen Storage, Sendai	Research and Development of Nano-Composite Materials for Hydrogen Storage	Y. Kojima
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
2009/5/14-15	口頭発表 広島大学 新技術説明会 (JST ホール, 市ヶ谷, 東京)	アルカリ金属水素化物の製造方法及び製造装置	宮岡裕樹
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
2009/7/2-3	ポスター発表 NEDO 平成 20 年度成果報告シンポジウム	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	小島由継, 坪田雅己
2009/7/12-17	ポスター発表 Gordon Research Conference-Metal-Hydrogen Systems- (Il Ciocco Hotel, Lucca, Italy)	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 Gordon Research Conference-Metal- Hydrogen Systems- (Il Ciocco Hotel, Lucca, Italy)	Characterization of ball-milled hydrogen storage materials by multi-nuclear solid state NMR spectroscopy	Y. Kojima K. Shimoda T. Ichikawa T. Nakagawa T. Ono
2009/7/26-8/1	口頭発表 ICCE/17 Seventeenth International Conference on Composites or Nano Engineering (Honolulu, Hawaii, USA)	Hydrogen Desorption Properties and NMR Characterization of ScH ₂ + MBn (M=Mg, Ca) Composites	K. Shimoda T. Nakawaga T. Ichikawa Y. Kojima
2009/8/6-7	口頭発表 第 49 回日本金属学会中四国 支部大会 (香川大学)	金属-炭素-水素系物質の 水素吸蔵・放出特性評価	山中俊幸, 久保 田光, 宮岡裕樹, 市川貴之、小島 由継
2009/8/20-22	口頭発表 材料における水素有効利用研 究会 (サロマ湖鶴雅リゾート, 北海道)	水素化物を用いた水素 貯蔵の新展開	小島由継
2009/8/20-22	口頭発表 材料における水素有効利用研 究会 (サロマ湖鶴雅リゾート, 北海道)	機 械 粉 碎 し た ScH ₂ -MBn(M=Mg, Ca)複 合材料の水素貯蔵能と NMR による構造評価	下田景士, 中川 鉄水, 小島健一, 市川貴之, 小島 由継
2009/9/3	ポスター発表 MH 利用開発研究会平成 21 年 度シンポジウム (大阪府立大 学, 大阪)	結晶性の異なるマグネ シウム-炭素複合物質の 局所構造解析	久保田光, 宮岡 裕樹, 坪田雅己, 市川貴之, 小島 由継
2009/9/3	ポスター発表 MH 利用開発研究会平成 21 年 度シンポジウム (大阪府立大 学, 大阪)	金属-炭素-水素系物質の 水素吸蔵・放出特性評価	山中俊幸, 久保 田光, 宮岡裕樹, 市川貴之, 小島 由継
2009/9/14	口頭発表 第 2 回「環境調和型水素製造 システムにおける生成と吸蔵 貯蔵の一体化研究会」 (桜華会館 梅の間, 名古屋)	高性能水素貯蔵技術の 開発 -現状の成果と課 題, 今後の展望について -	小島由継
2009/9/15-17	口頭発表	LiH-MgH ₂ 複合物質の水	坪田雅己, 小島

	日本金属学会 2009 年秋期大会 (京都大学, 京都)	素吸蔵/放出特性	由継
2009/9/15-17	口頭発表 日本金属学会 2009 年秋期大会 (京都大学, 京都)	水素分圧を制御した雰囲気下における LiNH_2 の反応性 II	日野聡, 市川貴之, 小島由継
2009/9/15-17	口頭発表 日本金属学会 2009 年秋期大会 (京都大学, 京都)	核磁気共鳴分光法による非晶質 M-B-H 系複合水素貯蔵物質の局所構造解析	下田景士, 中川鉄水, 市川貴之, 小島由継, 小島健一
2009/9/15-17	口頭発表 日本金属学会 2009 年秋期大会 (京都大学, 京都)	Systematic Analyses of Alkali-metal Amidoborane	張瑜, 市川貴之, 小島由継
2009/9/15-17	口頭発表 日本金属学会 2009 年秋期大会 (京都大学, 京都)	リチウムアミドの薄膜合成	中村耕生, 藤井博信, 坪田雅己, 宮岡裕樹, 市川貴之, 小島由継
2009/9/15-17	口頭発表 日本金属学会 2009 年秋期大会 (京都大学, 京都)	Study of Hydrogen Generation Mechanism by Reaction of MgD_2 and LiBH_4	曾亮, 下田景士, 市川貴之, 小島由継
2009/9/15-17	ポスター発表 日本金属学会 2009 年秋期大会 (京都大学, 京都)	Structural and Compositional Changes during Dehydrogenation of the Li-Mg-N-H System	籾雲雷, 市川貴之, 日野聡, 小島由継
2009/9/15-17	ポスター発表 日本金属学会 2009 年秋期大会 (京都大学, 京都)	$\text{M}(\text{Al}(\text{NH}_2)_4)_x$ (M=Li, Na, K, Mg, Ca) のガス放出特性及び構造評価	小野泰輔, 坪田雅己, 下田景士, 小島健一, 市川貴之, 小島由継
2009/9/25-28	口頭発表 日本物理学会 2009 年秋季大会 (熊本大学, 熊本)	アルカリ金属水素化物とアンモニアの反応 I: 機械的粉碎による反応性向上	坪田雅己, 山本ひかる, 中村耕生, 日野聡, 宮岡裕樹, 市川貴之, 小島由継
2009/9/25-28	口頭発表 日本物理学会 2009 年秋季大会 (熊本大学, 熊本)	アルカリ金属水素化物とアンモニアの反応 II: X 線を用いた表面分析	中村耕生, 坪田雅己, 仲武昌史, 日野聡, 宮岡裕

			樹, 市川貴之, 小島由継
2009/10/10-13	ポスター発表 第48回 NMR 討論会 (九州 大学馬出病院キャンパス医学 部百年講堂, 福岡)	水素貯蔵材料 $\text{LiAl}(\text{NH}_2)_2$ の熱分解における構造 変化: 固体 NMR による 評価	小野泰輔, 下田 景士, 坪田雅己, 小島健一, 市川 貴之, 小島由継
2009/10/10-13	ポスター発表 第48回 NMR 討論会 (九州 大学馬出病院キャンパス医学 部百年講堂, 福岡)	固体 NMR を用いた新規 水素貯蔵材料 $\text{M}(\text{Al}(\text{NH}_2)_2)_x$ の局所構造 解析	小野泰輔, 下田 景士, 坪田雅己, 小島健一, 市川 貴之, 小島由継
2009/10/11-15	口頭発表 Fundamental and Applied Hydrogen Storage Materials Development Task 22 IEA HIA EXPERT MEETING, Paris	Basic Research of Nano-Composite Materials for Hydrogen Storage (H-38)	T. Ichikawa
2009/10/18-22	口頭発表 IUPAC 5th International Symposium on Novel Materials and their Synthesis (Changhai, China)	New Trends on Hydrogen Storage with Hydrides	Y. Kojima T. Ichikawa
2009/10/18-22	口頭発表 IUPAC 5th International Symposium on Novel Materials and their Synthesis (Changhai, China)	Alkali Metal Amidoboranes: Synthesis, Structure and Hydrogen Storage Properties	Y. Zhang T. Ichikawa Y. Kojima
2009/10/18-22	口頭発表 IUPAC 5th International Symposium on Novel Materials and their Synthesis (Changhai, China)	Structural and Compositional Changes during Dehydrogenation of the Li-Mg-N-H System	Y. Teng T. Ichikawa Y. Kojima
2009/10/28-30	口頭発表 熱物性学会 (山形)	Thermal Properties of LiNH_2	A. Paik M. Tsubota T. Ichikawa Y. Kojima
2009/11/3-6	口頭発表 International Green Energy NanoCarbon Conference 2009	Nano-Composite of Hydrogenated Graphite and Lithium Hydride	T. Ichikawa H. Miyaoka Y. Kojima

	(Jeonju Core RivieraHotel, Jeonju, Korea)	asEnergy Storage Material	
2009/11/3-6	ポスター発表 International Green Energy NanoCarbon Conference 2009 (Jeonju Core Riviera Hotel, Jeonju, Korea)	Hydrogen Storage Properties of Nano-Compound of Magnesium and Carbon	H. Miyaoka A. Kubota M. Tsubota T. Ichikawa Y. Kojima
2009/11/3-6	ポスター発表 International Green Energy NanoCarbon Conference 2009 (Jeonju Core Riviera Hotel, Jeonju, Korea)	Synthesis and Hydrogen Absorption Properties of Lithium Carbide	T. Yamanaka H. Miyaoka T. Ichikawa Y. Kojima
2009/11/4	口頭発表 MH 利用開発研究会 平成 21 年度 第 3 回研究会 ((財)大阪科学技術センター, 大阪)	新規水素貯蔵システムの開発と水素吸蔵放出特性	小島由継
2009/11/11	口頭発表 広島大学 新技術説明会 (愛知県産業労働センター(ウイックあいち), 愛知)	アンモニアを用いた高圧水素の製造方法	小島由継
2009/11/13-15	口頭発表 The 4 th Hiroshima Workshop on Sustainable Materials Science	Research and Development of Nano-composite Materials for Hydrogen Storage	Y. Kojima
2009/11/13-15	ポスター発表 The 4 th Hiroshima Workshop on Sustainable Materials Science	Raman Scattering of LiNH ₂	A. Michigoe T. Hasegawa N. Ogita M. Udagawa Y. Teng M. Tsubota T. Ichikawa Y. Kojima S. Isobe
2009/11/13-15	ポスター発表 The 4 th Hiroshima Workshop on Sustainable Materials Science	H ₂ Desorption from LiH and NH ₃ Studied by Ab Initio Molecular Dynamics Simulation”	A. Yamane F. Shimojo K. Hoshino T. Ichikawa

			Y. Kojima
2009/11/30-12/4	口頭発表 2009 MRS Fall Meeting (Boston, USA)	Improvement of Hydrogenation Properties for the LiH-NH ₃ System by Mechanical Milling	M. Tsubota K. Tange S.Hino S. Isobe K. Nakamura M. Nakatake H. Yamamoto H. Miyaoka T. Ichikawa Y. Kojima
2009/11/30-12/4	口頭発表 2009 MRS Fall Meeting (Boston, USA)	Heat Propagation in LiNH ₂	B. Paik M. Tsubota T. Ichikawa Y. Kojima
2009/11/30-12/4	ポスター発表 2009 MRS Fall Meeting (Boston, USA)	Structural Investigation of Light Element Amorphous Hydrides by Solid-state NMR Techniques	K. Shimoda T. Nakagawa T. Ono K. Kojima T. Ichikawa Y. Kojima
2009/12/1-3	口頭発表 第 36 回 炭素材料学会年会 (仙台市戦災復興記念館, 宮城)	ボールミリング法を用いたグラファイトの水素化	宮岡裕樹, 市川貴之, 小島由継
2009/12/1-3	ポスター発表 第 36 回 炭素材料学会年会 (仙台市戦災復興記念館, 宮城)	マグネシウム-炭素複合物質の非晶質構造解析	久保田光, 宮岡裕樹, 坪田雅己, 市川貴之, 小島由継
2009/12/3	口頭発表 東広島市産学官マッチングイベント	アンモニアを用いた高圧水素製造	市川貴之
2009/12/3-4	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)	アンモニアを用いた高圧水素製造	宮岡裕樹, 市川貴之, 日野聡, 坪田雅己, 小島由継
2009/12/3-4	口頭発表 第 28 回水素エネルギー協会	金属水素化物/アンミン錯体複合系の水素貯蔵	日野聡, 坪田雅己, 市川貴之,

	(HESS)大会 (タワーホール船堀、東京)	特性	小島由継
2010/1/29	口頭発表 Hydrogen Energy Technology Research and Development Workshop (国立成功大学, China)	New Trends on Hydrogen Storage with Hydride	Y. Kojima
2010/2/9	口頭発表 IEA/HIA 水素実施協定・活動報告会 (NEDO 日比谷オフィス, 東京)	ナノ複合水素貯蔵物質の基礎研究	小島由継
2010/3/2	口頭発表 The 5th Japan-China Seminar on Hydrogen Storage Materials (Tokyo International Exchange Center, Tokyo)	Basic Research of Nano-Composite Materials for Hydrogen Storage	Y. Kojima
2010/3/2	ポスター発表 The 5th Japan-China Seminar on Hydrogen Storage Materials (Tokyo International Exchange Center, Tokyo)	The Synthesis and Thermal Decomposition of Alkali-Metal Amidoboranes: A Potential Hydrogen Storage Material	Yu Zhang K. Shimoda T. Ichikawa Y. Kojima
2010/3/2	ポスター発表 The 5th Japan-China Seminar on Hydrogen Storage Materials (Tokyo International Exchange Center, Tokyo)	Structural and Compositional Changes during Dehydrogenation of the Li-Mg-N-H System	Y. Teng T. Ichikawa Y. Kojima
2010/3/2	ポスター発表 The 5th Japan-China Seminar on Hydrogen Storage Materials (Tokyo International Exchange Center, Tokyo)	Hydrogen Exchange Effect in MgH_2 - $LiBH_4$ System	L. Zeng H. Miyaoka T. Ichikawa Y. Kojima
2010/3/3-5	口頭発表 FC EXPO 2010	水素機能材料の研究開発	小島由継
2010/3/28-30	口頭発表 日本金属学会 2010 春期大会 (筑波大学)	アンモニアとアルカリ金属水素化物の反応を用いた高圧水素製造	宮岡裕樹, 市川貴之, 日野 聡, 坪田雅己, 小島

			由継
2010/3/28-30	口頭発表 日本金属学会 2010 春期大会 (筑波大学)	Hydrogen Production from the Electrolysis of Liquid Ammonia	董宝霞、花田信 子、花輪亮、市 川貴之、日野聡、 鈴木啓史、高井 健一、小島由継
2010/3/28-30	ポスター発表 日本金属学会 2010 春期大会 (筑波大学)	金属アミドボラン系物 質の熱分解過程の NMR 解析	下 田 景 士 ， Zhang Yu, 市川 貴之，小島由継
2010/3/28-30	口頭発表 日本金属学会 2010 春期大会 (筑波大学)	軽元素水素貯蔵物質 LiNH ₂ のラマン散乱	道越明孝，長谷 川 巧，荻田典 男，宇田川眞行， Yunlei. Teng，坪 田雅巳，市川貴 之 小島由継， 北大工 磯部繁 人
2010/3/28-30	口頭発表 日本金属学会 2010 春期大会 (筑波大学)	水素貯蔵物質 LiNH ₂ の 反応温度領域のラマン 散乱	道越明孝，長谷 川 巧，荻田典 男，宇田川眞行， Yunlei Teng，坪 田雅巳 市川貴 之，小島由継， 北大工 磯部繁 人
2010/3/28-30	口頭発表 日本金属学会 2010 春期大会 (筑波大学)	Analysis of Li ₅ TiN ₃ Catalyst in the Li-N-H System	藤雲雷，市川貴 之，日野聡，小 島由継
2010/3/28-30	口頭発表 日本金属学会 2010 春期大会 (筑波大学)	液体アンモニアと LiMg 合金を用いた Li-Mg-N-H 系水素貯蔵 材料の合成と水素放出 特性	山中俊幸，小野 泰輔，土居光一， 田辺進吉，窪川 豊之， 市川貴之，小島 由継
2010/3/28-30	口頭発表 日本金属学会 2010 春期大会 (筑波大学)	Activation of Ammonia Borane Hybridized with Alkaline-Metal Hydrides:	張瑜，下田景士， 市川貴之，小島 由継

		Low-Temperature and High-Purity Hydrogen Generation	
2010/3/28-30	口頭発表 日本金属学会 2010 春期大会 (筑波大学)	Superior Hydrogen Exchange Effect in MgH ₂ -LiBH ₄ Composite	曾亮, 宮岡裕樹, 市川貴之, 小島由継
2010/3/28-30	口頭発表 日本金属学会 2010 年春期大会 (筑波大学、筑波)	第一原理分子動力学法による MH(M=Li、Na、K)・NH ₃ 系の水素放出	山根阿樹、下條冬樹、星野公三、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
2009/5/11-5/12	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	S Isobe M. O. Jones W. I. F. David M. Gutmann T. Ichikawa Y. Kojima P. P. Edwards S. Ohnuki
2009/5/26-5/29	ポスター発表 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, 姚 昊, 橋本直幸, 大貫惣明
2009/5/26-5/29	ポスター発表 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	平澤寛子, 奥寺公也, 王 永明, 磯部繁人, 橋本直幸, 大貫惣明
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	Structural Change of NaAlH	Y. Hao

	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	during in-situ heating in HVEM	S. Isobe Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki
2009/7/24	ポスター発表 日本金属学会北海道支部サマーセッション, 室蘭	LiH-Mg(NH ₂) ₂ 系水素吸蔵材料の混合比と水素放出ピーク温度に関する組織学的研究	若杉剛伸, 王 永明, 大貫惣明, 橋本直幸
2009/7/24	ポスター発表 日本金属学会北海道支部サマーセッション, 室蘭	In-situ High-resolution TEM Observation for decomposition of NaAlH ₄	H. Yao, H. Kawasaki, S. Isobe, Y. Wang, N. Hashimoto, S. 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
2009/8/19-8/22	口頭発表 H21 年度 材料における水素有効利用研究会, 北見	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	磯部繁人, 川崎洋, Yao Hao, Wang Yongming, 橋本直幸, 大貫惣明
2009/9/15-9/17	口頭発表 日本金属学会 2009 年秋期 (第 145 回)講演大会, 京都	電子顕微鏡その場観察による Mg 系水素貯蔵材料の反応メカニズムの検討	小野晃史, 磯部繁人, 王 永明, 橋本直幸, 大貫惣明
2009/9/15-9/17	口頭発表 日本金属学会 2009 年秋期 (第 145 回)講演大会, 京都	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, 山本ひかる, 宮岡裕樹, 市川貴之, 小島由継
2009/9/15-9/17	口頭発表 日本金属学会 2009 年秋期 (第 145 回)講演大会, 京都	In-situ High-resolution TEM Observation for Decomposition of NaAlH ₄	H. Yao, H. Kawasaki, S. Isobe, Y. Wang, N. Hashimoto, S. Ohnuki
2009/10/7-10/11	口頭発表 HYSYDAYS2009, Torino	Variable Temperature Neutron Diffraction Studies of Single Crystals of LiND ₂	S Isobe M. O. Jones W. I. F. David

			M. Gutmann T. Ichikawa Y. Kojima P. P. Edwards S. Ohnuki,
2009/11/13-1 1/15	ポスター発表 The 4 th Hiroshima Workshop on Sustainable Materials Science	Microscopic Reaction Mechanism of Hydrogen Storage Materials by TEM ⁷	S. Isobe Y. Wang A. Ono H. Hirasawa Y. Hao N. Hashimoto S. Ohnuki T. Ichikawa Y. Kojima
2009/11/28-1 1/29	口頭発表 ミニシンポジウム・電子 顕微鏡によるその場観察 と材料への応用展開, 登 別	口頭発表 ミニシンポジ ウム・電子顕微鏡によるそ の場観察と材料への応用 展開, 登別	大貫惣明
2009/11/30-12 /4	ポスター発表 MRS Fall Meeting, Boston	In-site TEM observation for reaction of LiH and NaH with NH ₃ by means of environmental cell	S. Isobe Y. Wang H. Yamamoto H. Miyaoka N. Hashimoto S. Ohnuki T. Ichikawa Y. Kojima
2009/11/30-12 /4	ポスター発表 MRS Fall Meeting, Boston	In-site TEM observation for reaction of LiH and NaH with NH ₃ by means of environmental cell	H. Hirasawa S. Isobe Y. Wang H. Yamamoto H. Miyaoka N. Hashimoto S. Ohnuki T. Ichikawa Y. Kojima
2009/11/30-1	ポスター発表	In-situ TEM observation for	A. Ono

2/4	MRS Fall Meeting, Boston	reaction mechanism in MgH ₂ hydrogen storage material	S. Isobe Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki
2009/12/12	口頭発表 平成 21 年度日本顕微鏡学会北海道支部学術講演会, 酪農学園大学	In-situ High-resolution TEM Observation for Decomposition of NaAlH ₄	H. Yao, H. Kawasaki, S. Isobe, Y. Wang, N. Hashimoto, S. Ohnuki
2010/1/21-22	口頭発表 日本金属学会北海道支部冬季講演大会, 北海道大学	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, H. Yao, 森田 襟, 磯部繁人, 王 永明, 橋本直幸, 大貫惣明
2010/1/21-22	口頭発表 日本金属学会北海道支部冬季講演大会, 北海道大学	電子顕微鏡による LiH 系、NaH 系水素吸蔵材料反応機構の検討	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
2010/1/21-22	口頭発表 日本金属学会北海道支部冬季講演大会, 北海道大学	Li-N 系化合物に対する電子エネルギー損失分光法 (EELS) の有用性	森田 襟, 磯部繁人, 王 永明, 橋本直幸, 大貫惣明, 小野泰輔, 市川貴之, 小島由継
2010/1/21-22	口頭発表 日本金属学会北海道支部冬季講演大会, 北海道大学	Study on Decomposition Process of Sodium Alanate by Means of Transmission Electron Microscope	H. Yao, S. Isobe, Y. Wang, N. Hashimoto, S. Ohnuki
2010/1/21-22	口頭発表 日本金属学会北海道支部冬季講演大会, 北海道大学	アルカリ(土類)金属-炭素複合物質の微細構造	山田須弥人, 磯部繁人, 王 永明, 橋本直幸, 大貫惣明, 山中俊幸, 市川貴之, 小島由継
2010/1/21-22	口頭発表 日本金属学会北海道支部冬季講演大会, 北海道大学	Sc-M-B-H 系水素貯蔵物質 (M = Mg, Ca) の TEM による微視的観察	稲月亮太, 磯部繁人, 王 永明, 橋本直幸, 大貫惣明, 中川鉄水, 市川貴之, 小島由継
2010/1/21-22	口頭発表 日本金属学会北海道支部	透過電子顕微鏡による Li ₂ NH の水素化反応機構	堂腰美妃, 磯部繁人, 王 永明, 橋本

	冬季講演大会, 北海道大学	の検討	直幸, 大貫惣明, 日野聡, 市川貴之, 小島由継
2010/1/21-22	口頭発表 日本金属学会北海道支部 冬季講演大会, 北海道大学	水素貯蔵材料 AB-MH(M=Li,Na)複合物質の微細構造	李忠賢, 磯部繁人, 王永明, 橋本直幸, 大貫惣明, Yu Zhang, 市川貴之, 小島由継
2010/3/28-30	口頭発表 日本金属学会 2010 春期大会, 筑波大学	TEM を用いた軽元素系水素貯蔵物質の反応メカニズム検証	磯部繁人, 王永明, ヤオハオ, 小野晃史, 平澤寛子, 橋本直幸, 大貫惣明, 広島大 市川貴之, 小島由継
2010/3/28-30	ポスター発表 日本金属学会 2010 春期大会, 筑波大学	Sc-M-B-H 系水素貯蔵物質 (M = Mg, Ca) の TEM による微視的観察	稲月亮太, 磯部繁人, 王永明, 橋本直幸, 大貫惣明, 中川鉄水, 市川貴之, 小島由継
2010/3/28-30	口頭発表 日本金属学会 2010 春期大会, 筑波大学	AB-MH(M=Li,Na)複合物質の TEM を用いた微視的観察	李忠賢, 磯部繁人, 王永明, 橋本直幸, 大貫惣明
2010/3/28-30	ポスター発表 日本金属学会 2010 春期大会, 筑波大学	電子顕微鏡その場観察による触媒添加した MgH ₂ の脱水素化反応機構の検討	森田 襟, 小野晃史, 磯部繁人, 王永明, 橋本直幸, 大貫惣明
2010/3/28-30	口頭発表 日本金属学会 2010 春期大会, 筑波大学	透過電子顕微鏡による Li ₂ NH の水素化反応機構の検討	堂腰美妃, 磯部繁人, 王永明, 橋本直幸, 大貫惣明, 日野聡, 宮岡裕樹, 市川貴之, 小島由継
2010/3/28-30	口頭発表 日本金属学会 2010 春期大会, 筑波大学	Study on Decomposition Process of Sodium Alanate by Means of Transmission Electron Microscope	H. Yao, S. Isobe, Y. Wang, N. Hashimoto, S. Ohnuki

(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 Gordon Research Conference on Hydrogen-Metal Systems	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 Gordon Research Conference on Hydrogen-Metal Systems	Electrochemical hydrogen charge for the formation of Magnesium and Aluminum hydrides in non-aqueous solution	Nobuko Hanada Ryo Hanawa Hiroshi Suzuki Kenichi Takai
2009/9/15-9/17	口頭発表 日本金属学会 2009 年秋季大会	LiH+M(M=Mg,Al)を用いた電解チャージによる水素化物の合成	花田信子、嘉村彰人、鈴木啓史、高井健一(上智大学)、市川貴之、小島由継(広島大学)
2009/9/15-9/17	口頭発表 日本金属学会 2009 年秋季大会	電解水素チャージを施した純 Al の水素吸蔵放出特性と水素存在状態	鈴木啓史、花輪亮、花田信子、高井健一
2009/9/15-9/17	口頭発表 日本金属学会 2009 年秋季大会	純 Ti の水素吸蔵特性に与える引張り変形の影響	鈴木啓史、谷口尚史、花田信子、高井健一
2009/11/13-15	ポスター発表 The 4 th Hiroshima Workshop on Sustainable Materials Science	Electrochemical Properties of Al + 3LiH or AlH ₃ in Li-ion Battery System	N. Hanada H. Suzuki K. Takai T. Ichikawa Y. Kojima,
2009/12/12	口頭発表 Processing and Fabrication of Advanced Materials-XVIII	Hydrogen absorption properties and trapping states of pure aluminum by electrolysis charging	K. Takai N. Hanada H. Suzuki R. Hanawa D. Kobayashi
2010/3/28-	口頭発表	電解チャージによる高容量	花田信子、嘉村彰

30	日本金属学会 2010 春期大会 (筑波大学)	水素化物の合成	人, 鈴木啓史, 高井健一, 市川貴之, 小島由継
2010/3/28-30	口頭発表 日本金属学会 2010 春期大会 (筑波大学)	純 Ti の水素吸蔵・放出特性に与える変形の影響	鈴木啓史、谷口尚史、花田信子、高井健一 (上智大学)

(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
2009/6/12	口頭発表 第 166 回腐食防食シンポジウム	放射光を利用した金属中の水素-金属原子相互作用の研究	青木勝敏、町田晃彦
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
2009/6/17	口頭発表 5th International Workshop on Reactions Involving Oxygen & Hydrogen	High-temperature oxidation of titanium-nickel alloy and its effect on the formation of protective layer	T. Kasai, D. Yamazaki, M. Sowa, M. Okada, A. Yoshigoe, Y. Teraoka
2009/7/14	ポスター発表 Gordon Research Conference on Hydrogen-Metal Systems	Formation and decomposition of AlH ₃ in the aluminum-hydrogen system	H. Saitoh, A. Machida, Y. Katayama, K. Aoki
2009/7/16	ポスター発表 Gordon Research Conference on Hydrogen-Metal Systems	Pressure-induced phase separation of rare-earth metal hydrides	A. Machida, T. Watanuki, D. Kawana, K. Aoki
2009/7/16	ポスター発表 Gordon Research Conference on	Observation of Pressure-induced Disproportionation Reaction of	Y. Sakurai, A. Machida, K. Aoki

	Hydrogen-Metal Systems	LaH ₂ Using Infrared Reflection and Raman Spectroscopies	
2009/7/21	ポスター発表 International Conference on the Applications of Mössbauer Effect 2009	An Element Specific Mössbauer Study on Hydrides of the SmFe ₂ C ₁₅ Laves Phase Compound	R. Masuda, T. Mitsui, K. Ito, Y. Kobayashi, S. Kitao, M. Seto
2009/7/27	ポスター発表 The 14th International conference XAFS14	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
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	Pressure-Induced Magnetic Transition of Iron Hydride	N. Hirao T. Mitsui Y. Ohishi

	and Technology (Joint AIRAPT-22 & HPCJ-50 Conference)		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 Science and Technology (Joint AIRAPT-22 & HPCJ-50 Conference)	Pressure induced phase separation of rare-earth metal dihydrides	A.Machida T.Watanuki D.Kawana 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
2009/9/3	口頭発表 MH 利用開発研究会	高圧力下における希土類金属水素化物の構造物性研究	齋藤寛之
2009/9/4	ポスター発表 第13回 SPring-8 シンポジウム	SP-8 における核共鳴散乱研究手法の高度化、応用研究の現状	三井隆也、瀬戸誠、増田亮、齋藤真器名、笠井秀隆
2009/9/8	口頭発表 第一回ミニ連携研究会 ー量子ビームを用いた高圧物性研究ー	高圧力下における希土類金属水素化物の構造物性研究	町田晃彦

2009/9/10	ポスター発表 European High Pressure Research Group meeting	Structural phase relations of iron in dense hydrogen under low temperature and high-pressure	Y. Ohishi, N. Hirao, T. Matsuoka, T. Mitsui, K. Takemura, A. Machida, K. Aoki
2009/9/10	ポスター発表 European High Pressure Research Group meeting	Insulator to metal transition in compressed YH _x (x~3)	T. Matsuoka, H. Nugyen, Y. Nakagawa, K. Shimizu, Y. Nakamoto, T. Kagayama, Y. Ohishi, A. Machida, K. Aoki
2009/9/10	口頭発表 第70回応用物理学会学術 講演会	放射光 X 線光電子分光によ る TiAl 酸化過程の研究	橋之口道宏、角 本雄一、戸出真 由美、岡田美智 雄、James Harries、吉越章 隆、寺岡有殿、 笠井俊夫
2009/9/15	口頭発表 日本金属学会 2009 年秋期 大会	高温高压水素流体と Al の直 接反応による AlH ₃ 合成	齋藤寛之、町田 晃彦、片山芳則、 青木勝敏
2009/9/15	ポスター発表 日本金属学会 2009 年秋季 講演大会	高分解能軟 X 線放射光光電 子分光による重水素化 VCrTi の表面分析	戸出真由美、 James Harries、寺 岡有殿、角本雄 一、井上敬介、 吉越章隆
2009/9/24	ポスター発表 10th Atomically Controlled Surface, Interface and Nanostructures	Synchrotron radiation photoemission study on native oxides of VCrTi alloy and its modification by deuterium ion implantation	Y. Teraoka, J. Harries, M. Tode, A. Yoshigoe
2009/9/27	口頭発表	液体鉄水素化物の構造 III	片山芳則、齋藤

	日本物理学会 2009 年秋季大会		寛之, 青木勝敏
2009/9/27	ポスター発表 日本物理学会 2009 年秋季大会	軟 X 線発光分光によるアルミニウム水素化物の電子状態の研究	竹田幸治, 岡根哲夫, 藤森伸一, 保井晃, 斎藤祐児, 山上浩志, 齋藤寛之, 室隆桂之, 加藤有香子, 木下豊彦
2009/9/28	口頭発表 日本物理学会 2009 年秋季大会	149Sm 放射光核共鳴散乱による希土類鉄系水素化物 SmFe ₂ の研究 II	増田 亮, 三井隆也, 伊藤恵司, 小林康浩, 北尾真司, 瀬戸誠
2009/9/28	口頭発表 日本物理学会 2009 年秋季大会	GdFe ₂ 水素化物の放射光メスbauer分光	三井隆也, 増田亮, 瀬戸誠, 平尾直久
2009/10/6	ポスター発表 11th International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure	Electronic structure near the surface region in the ternary transition metal alloy Ti ₃₅ V ₂₅ Cr ₄₀ by photoemission spectroscopy	Y. Haruyama, Y. Teraoka, S. Matsui
2009/10/18	ポスター発表 International Workshop on Electronic Spectroscopy for Gas-phase Molecules and Solid Surfaces	Chemical-state resolved depth-profiling using angle-resolved X-ray photoelectron spectroscopy and the maximum entropy method	J. Harries, M. Tode, Y. Sumimoto, K. Inoue, A. Yoshigoe, Y. Teraoka
2009/11/5	ポスター発表 第 50 回真空に関する連合講演会	重水素イオン注入した水素貯蔵材 (V ₂₅ Cr ₄₀ Ti ₃₅) の高分解能軟 X 線放射光光電子分光による自然酸化膜の熱安定性の評価	戸出真由美, James Harries, 寺岡有殿, 角本雄一, 井上敬介, 吉越章隆
2009/11/10	ポスター発表 AVS 56th International Symposium and Exhibition	In-situ XPS depth-profiling of hydrogen storage material VCrTi during thermal annealing	J. R. Harries, Y. Teraoka, A. Yoshigoe, M. Tode
2009/11/17	ポスター発表	Chemical state resolved	J. R. Harries,

	5th International Workshop on High-Resolution Depth Profiling	depth-profiling using synchrotron XPS and the maximum entropy method	M. Tode, K. Inoue, Y. Sumimoto, A. Yoshigoe, Y. Teraoka
2009/11/30	ポスター発表 MRS Fall meeting2009	Raman and Visible Absorption Study of TbH ₃ Under High Pressure	T. Kume, N. Shimura, H. Shimizu, S. Sasaki, A. Machida, T. Watanuki, K. Aoki, K. Takemura
2009/12/1	口頭発表(招待講演) MRS Fall meeting2009	The fundamental study of the structural and electronic properties of metal hydrides using synchrotron radiation x-rays	A. Machida, H. Saitoh, Y. Katayama, K. Aoki
2009/12/2	口頭発表 原子力機構関西光科学研究所高校生向けセミナー	クリーンエネルギー社会の実現をめざして	齋藤寛之
2009/12/13	口頭発表 (招待講演) Processing and Fabrication of Advanced Materials XVIII	Hydrogenation and dehydrogenation of passivated aluminum under high pressure	H. Saitoh, A. Machida, Y. Sakurai, Y. Katayama, K. Aoki
2010/1/8	口頭発表 (招待講演) 第46回 X線材料強度に関する討論会	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, 齋藤寛之, 片山芳則, 青木勝敏
2010/1/9	ポスター発表 第23回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム	高分解能軟 X線放射光光電子分光による重水素化 VCrTi 表面の熱安定性の評価	戸出真由美, James Harries, 寺岡有殿, 角本雄一, 井上敬介, 吉越章隆
2010/1/9	ポスター発表 第23回日本放射光学会年会・放射光科学合同シン	La(Fe _{0.88} Si _{0.12}) ₁₃ の電子状態	鎌倉望, 岡根哲夫, 竹田幸治, 藤森伸一, 齋藤

	ポジウム		祐児, 山上浩志, 藤森淳
2010/1/9	ポスター発表 第23回日本放射光学会年 会・放射光科学合同シン ポジウム	TiVCr 系水素吸蔵合金表面の 電子状態	春山雄一、寺岡 有殿、松井真二
2010/1/9	ポスター発表 第23回日本放射光学会年 会・放射光科学合同シン ポジウム	TiAl 合金表面酸化過程の放 射光 X 線光電子分光分析	橋之口道宏、角 本雄一、戸出真 由美、James Harries、寺岡有 殿、岡田美智雄、 笠井俊夫
2010/2/25	口頭発表 5th JAEA-Symposium on Synchrotron Radiation Research 2010 –Material Science on Metal Hydride–	Synchrotron Radiation Mössbauer study on Metal Hydrides	三井隆也
2010/2/25	ポスター発表 5th JAEA-Symposium on Synchrotron Radiation Research 2010 –Material Science on Metal Hydride–	Instability of rare-earth metal dihydrides at high pressure	A. Machida, T. Watanuki , D. Kawana , K. Aoki
2010/2/25	ポスター発表 5th JAEA-Symposium on Synchrotron Radiation Research 2010 –Material Science on Metal Hydride–	Observation of Pressure-induced Disproportionation Reaction of LaH ₂ Using Vibrational Spectroscopies	Y. Sakurai , A. Machida , K. Aoki
2010/2/25	ポスター発表 5th JAEA-Symposium on Synchrotron Radiation Research 2010 –Material Science on Metal Hydride–	Structure of liquid iron hydrogen alloy under high pressure	Y. Katayama, H. Saitoh, K. Aoki
2010/2/25	ポスター発表 5th JAEA-Symposium on Synchrotron Radiation Research 2010 –Material Science on Metal Hydride–	Thermal degradation process of deuterium ion implanted V25Cr40Ti35 using high-resolution soft X-ray synchrotron radiation	M. Tode, J. R. Harries, Y. Teraoka, A. Yoshigoe

		photoelectron spectroscopy	
2010/2/25	ポスター発表 5th JAEA-Symposium on Synchrotron Radiation Research 2010 –Material Science on Metal Hydride–	Dynamic structural change of Pd nanoparticles during hydrogen absorption	D. Matsumura, Y. Okajima, S. Higuchi, Y. Nishihata, J. Mizuki
2010/2/25	ポスター発表 5th JAEA-Symposium on Synchrotron Radiation Research 2010 –Material Science on Metal Hydride–	⁵⁷ Fe AND ¹⁴⁹ Sm MOSSBAUER STUDY ON HYDRIDES OF THE SmFe ₂ C ₁₅ LAVES PHASE COMPOUND	増田亮, 三井隆 也, 伊藤恵司, 小林康浩, 北尾 真司, 瀬戸誠
2010/2/25	ポスター発表 5th JAEA-Symposium on Synchrotron Radiation Research 2010 –Material Science on Metal Hydride–	Electronic structure of lithium amide	N. Kamakura, Y. Takeda, Y. Saitoh, H. Yamagami, M. Tsubota, B. Paik, T. Ichikawa, Y. Kojima, T. Muro, Y. Kato, T. Kinoshita
2010/2/25	ポスター発表 5th JAEA-Symposium on Synchrotron Radiation Research 2010 –Material Science on Metal Hydride–	Departure Process of Hydrogen from Highly-Hydrogenated Diamond-Like Carbon Film by Exposure to Synchrotron Radiation	K. Kanda, K. Yokota, M. Tagawa, M. Tode, Y. Teraoka, S. Matsui
2010/2/25	ポスター発表 5th JAEA-Symposium on Synchrotron Radiation Research 2010 –Material Science on Metal Hydride–	Effect of Vacuum Ultraviolet Exposure and Surface Oxide Layer on the Hydrogen Desorption from Hydrogenated Diamond-like Carbon Film	M. Tagawa, K. Yokota, Y. Furuyama, K. Kanda, M. Tode, A. Yoshigoe, Y. Teraoka
2010/2/25	ポスター発表 5th JAEA-Symposium on	The study of oxidation on TiAl with photoemission	M. Hashinokuchi, Y. Sumimoto,

	Synchrotron Radiation Research 2010 –Material Science on Metal Hydride–	spectroscopy in conjunction with synchrotron radiation	M. Tode, J. Haries, M. Okada, Y. Teraoka, T. Kasai
2010/2/25	ポスター発表 5th JAEA-Symposium on Synchrotron Radiation Research 2010 –Material Science on Metal Hydride–	High-pressure structural and magnetic properties of iron hydride	平尾直久, 大石泰生, 三井隆也, 瀬戸誠, 青木勝敏, 竹村謙一
2010/2/25	ポスター発表 5th JAEA-Symposium on Synchrotron Radiation Research 2010 –Material Science on Metal Hydride–	Pressure induced phase transition of rare earth hydrides studied by Raman and absorption spectroscopy	T. Kume, N. Shimura, S. Sasaki, H. Shimizu, A. Machida, T. Watanuki, K. Aoki, K. Takemura
2010/2/26	口頭発表 5th JAEA-Symposium on Synchrotron Radiation Research 2010 –Material Science on Metal Hydride–	Hydrogenation and dehydrogenation of aluminum under high pressure and high temperature	H. Saitoh, A. Machida, Y. Katayama, K. Aoki
2010/2/26	口頭発表 5th JAEA-Symposium on Synchrotron Radiation Research 2010 –Material Science on Metal Hydride–	Chemical bonding in AlH ₃ - synchrotron soft x-ray spectroscopy	Y. Takeda, Y. Saitoh, H. Yamagami, H. Saitoh, A. Machida, K. Aoki, T. Muro, Y. Katoh, T. Kinoshita
2010/3/1	口頭発表 国際水素貯蔵フォーラム 2010	Hydrogenation and dehydrogenation of aluminum under high pressure and high temperature	齋藤寛之
2010/3/11	ポスター発表	軟 X 線照射による DLC 膜	神田一浩、横田

	兵庫県立大学高度産業科学技術研究所 先端技術セミナー2010	からの水素脱離過程	久美子、田川雅人、戸出真由美、寺岡有殿、松井真二
2010/3/17	口頭発表 第57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 膜からの水素放出過程	神田 一浩, 戸出真由美, 寺岡 有殿, 松井 真二
2010/3/19	口頭発表 第57回応用物理学関係連合講演会	高水素化 DLC 膜からの水素脱離に対する SiO ₂ 保護膜の効果	田川雅人、横田久美子、古山雄一、戸出真由美、吉越章隆、寺岡有殿
2010/3/20	口頭発表 日本物理学会第65回年次大会	LaH ₂ における圧力誘起相分離の温度効果	町田晃彦, 綿貫徹, 川名大地, 青木勝敏
2010/3/22	口頭発表 日本物理学会第65回年次大会	液体遷移金属水素合金の構造	片山芳則, 齋藤寛之, 青木勝敏
2010/3/23	ポスター発表 日本物理学会第65回年次大会	軟 X 線発光分光によるリチウムアミドの電子状態の研究	鎌倉望、竹田幸治、齋藤祐児、山上浩志、坪田雅己、B. Paik、市川貴之、小島由継、室隆桂之、加藤有香子、木下豊彦
2010/3/28	口頭発表 日本金属学会2010年春期大会	放射光を利用した金属水素化物の相転移と水素吸収・放出反応研究	青木勝敏, 町田晃彦
2010/3/28	口頭発表 日本金属学会2010年春期大会	Al-H 系における AlH ₃ の生成と結晶成長過程	齋藤寛之、岡島由佳、米田安宏、川名大地、綿貫徹、町田晃彦、片山芳則、青木勝敏
2010/3/29	口頭発表 日本金属学会2010年春期	X 線吸収分光による Mg(BH ₄) ₂ の水素貯蔵特性に	松村大樹、大山隆啓、岡島由佳、

	大会	おける TiCl3 添加効果の解明	西畑保雄、李海文、池田一貴、折茂慎一
--	----	-------------------	--------------------

(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
2009/9/9	口頭発表 第70回応用物理学会 学術講演会	高水素化DLC膜に対する軟X線照射効果	神田一浩、新部正人、横田久美子、田川雅人、松井真二
2009/9/10	口頭発表 第70回応用物理学会 学術講演会	Ga FIB-CVD DLC 膜からのアニールによる Ga の脱離過程	神田一浩、岡田真、姜 有志、新部正人、鈴木常生、松井真二
2009/9/14	口頭発表 16th International Conference on Surface Modification of Materials by Ion Beams (SMMIB2009)	Departure Process of Ga from DLC Films Fabricated using Ga Focused Ion Beam Assisted Deposition by Heat Treatment	Kazuhiro Kanda, Makoto Okada, Yuji Kang, Tsunee Suzuki, and Shinji Matsui
2009/10/6	ポスター発表 11th International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure	Electronic structure near the surface region in the ternary transition metal alloy Ti ₃₅ V ₂₅ Cr ₄₀ by photoemission spectroscopy	Y. Haruyama, Y. Teraoka, S. Matsui
2009/11/4	口頭発表 第50回真空に関する連合講演会	高水素化DLCフィルムへの紫外線照射による脱水素化反応	横田久美子、田川雅人、松本康司、神田一浩、北村晃
2009/11/18	ポスター発表 International Microprocesses and	Structural Changes in the Diamond Like Carbon Films Fabricated using Ga Focused Ion Beam Assisted	Kazuhiro Kanda, Makoto Okada, Yuji Kang,

	Nanotechnology Conference (MNC2009)	Deposition by Heat Treatment	Masahito Niibe, Akira Wada, Haruhiko Ito, Tsuneo Suzuki, and Shinji Matsui
2009/11/20	ポスター発表 第23回ダイヤモンドシンポジウム DLC 国際セッション	NEXAFS study of the annealing effect on the DLC films fabricated using Ga focused ion beam assisted deposition	Kazuhiro Kanda, Makoto Okada, Yuji Kang, Masahito Niibe, Shinji. Matsui
2010/1/8	口頭発表 第23回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム	軟 X 線照射による高水素化 DLC 膜の表面改質	神田一浩、横田久美子、田川雅人、松井真二
2010/1/9	ポスター発表 第23回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム	TiVCr 系水素吸蔵合金表面の電子状態	春山雄一、寺岡有殿、松井真二
2010/2/25	ポスター発表 JAEA-Symposium on Synchrotron Radiation Research 2010 – Material Science on Metal Hydride–	Departure Process of Hydrogen from Highly-Hydrogenated Diamond-Like Carbon Film by Exposure to Synchrotron Radiation	K. Kanda, K. Yokota, M. Tagawa, M. Tode, Y. Teraoka, S. Matsui
2010/2/25	ポスター発表 JAEA-Symposium on Synchrotron Radiation Research 2010 – Material Science on Metal Hydride–	Effect of Vacuum Ultraviolet Exposure and Surface Oxide Layer on the Hydrogen Desorption from Hydrogenated Diamond-like Carbon Film	M. Tagawa, K. Yokota, Y. Furuyama, K. Kanda, M. Tode, A. Yoshigoe, Y. Teraoka
2010/3/11	ポスター発表 兵庫県立大学高度産業科学技術研究所 先端技術セミナー2010	軟 X 線照射による DLC 膜からの水素脱離過程	神田一浩、横田久美子、田川雅人、戸出真由美、寺岡有殿、松井真二
2010/3/17	口頭発表	軟 X 線照射による水素化 DLC 膜	神田 一浩, 戸出

	第 57 回応用物理学関係連合講演会	からの水素放出過程	真由美, 寺岡 有殿, 松井 真二
2010/3/17	口頭発表 第 57 回応用物理学関係連合講演会	高水素化 DLC 膜への真空紫外線照射効果	横田久美子、田川雅人、松本康司、神田一浩、古山雄一

(材料物性 G:神戸大学)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2009/9/9	口頭発表 第 70 回応用物理学学会 学術講演会	高水素化 DLC 膜に対する軟 X 線照射効果	神田一浩、新部正人、横田久美子、田川雅人、松井真二
2009/11/4	口頭発表 第 50 回真空に関する 連合講演会	高水素化 DLC フィルムへの紫外線照射による脱水素化反応	横田久美子、田川雅人、松本康司、神田一浩、北村晃
2010/1/8	口頭発表 第 2 3 回日本放射光 学会年会・放射光科学 合同シンポジウム	軟 X 線照射による高水素化 DLC 膜の表面改質	神田一浩、横田久美子、田川雅人、松井真二
2010/2/25	ポスター発表 JAEA-Symposium on Synchrotron Radiation Research 2010 - Material Science on Metal Hydride-	Departure Process of Hydrogen from Highly-Hydrogenated Diamond-Like Carbon Film by Exposure to Synchrotron Radiation	K. Kanda, K. Yokota, M. Tagawa, M. Tode, Y. Teraoka, S. Matsui
2010/2/25	ポスター発表 JAEA-Symposium on Synchrotron Radiation Research 2010 - Material Science on Metal Hydride-	Effect of Vacuum Ultraviolet Exposure and Surface Oxide Layer on the Hydrogen Desorption from Hydrogenated Diamond-like Carbon Film	M. Tagawa, K. Yokota, Y. Furuyama, K. Kanda, M. Tode, A. Yoshigoe, Y. Teraoka
2010/3/17	口頭発表 第 57 回応用物理学関係連合講演会	高水素化 DLC 膜からの水素脱離に対する SiO ₂ 保護膜の効果	田川雅人、横田久美子、古山雄一、戸出真由美、

			吉越章隆、寺岡有殿
2010/3/17	口頭発表 第 57 回応用物理学関係連合講演会	高水素化 DLC 膜への真空紫外線照射効果	横田久美子、田川雅人、松本康司、神田一浩、古山雄一

(材料物性 G:大阪大学)

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	High-temperature oxidation of titanium-nickel alloy and its effect on the formation of protective layer	T. Kasai, D. Yamazaki, M. Sowa, M. Okada, A. Yoshigoe, Y. Teraoka
2009/9/10	ポスター発表 European High Pressure Research Group meeting	Insulator to metal transition in compressed YH _x (x~3)	T. Matsuoka, H. Nugyen, Y. Nakagawa, K. Shimizu, Y. Nakamoto, T. Kagayama, Y. Ohishi, A. Machida, K. Aoki
2009/9/10	口頭発表 第 70 回応用物理学学会 学術講演会	放射光 X 線光電子分光による TiAl 酸化過程の研究	橋之口道宏、角本雄一、戸出真由美、岡田美智雄、James Harries、吉越章隆、寺岡有殿、笠井俊夫
2009/9/15	ポスター発表 平成 21 年度 G-COE 若手秋の学校「新しい 量子物質・物性・機能 の研究」	Transport properties of YH ₃ under high pressure and low temperature	Hyuen Nugyen, Chi Zhenhua、松岡岳洋、中川悠葵、加賀山朋子、清水克哉
2009/9/28	口頭発表	Transport properties of YH ₃ under	Hyuen Nugyen,

	第6回8大学博士学生交流フォーラム	high pressure and low temperature	Chi Zhenhua、松岡岳洋、中川悠葵、加賀山朋子、清水克哉
2010/1/9	ポスター発表 第23回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム	TiAl 合金表面酸化過程の放射光X線光電子分光分析	橋之口道宏、角本雄一、戸出真由美、James Harries、寺岡有殿、岡田美智雄、笠井俊夫
2010/2/25	ポスター発表 JAEA-Symposium on Synchrotron Radiation Research 2010 – Material Science on Metal Hydride–	The study of oxidation on TiAl with photoemission spectroscopy in conjunction with synchrotron radiation	M. Hashinokuchi, Y. Sumimoto, M. Tode, J. Haries, M. Okada, Y. Teraoka, T. Kasai
2010/2/25	ポスター発表 JAEA-Symposium on Synchrotron Radiation Research 2010 – Material Science on Metal Hydride–	High pressure effect on yttrium tri-hydride property	Hyuen Nugyen, Chi Zhenhua、中川悠葵、中本有紀、加賀山朋子、清水克哉
2010/2/25	ポスター発表 JAEA-Symposium on Synchrotron Radiation Research 2010 – Material Science on Metal Hydride–	Photoconductivity in compressed transparent Yttrium Hydride	Chi Zhenhua、Hyuen Nugyen、木村圭太、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
2009/7/29	口頭発表 International Conferences on High Pressure Science and Technology (Joint	Pressure-Induced Magnetic Transition of Iron Hydride	N. Hirao T. Mitsui Y. Ohishi M. Seto K. Aoki

	AIRAPT-22 & HPCJ-50 Conference)		K. Takemura
2009/9/10	ポスター発表 European High Pressure Research Group meeting	Structural phase relations of iron in dense hydrogen under low temperature and high-pressure	Y. Ohishi, N. Hirao, T. Matsuoka, T. Mitsui, K. Takemura, A. Machida, K. Aoki
2009/9/10	ポスター発表 European High Pressure Research Group meeting	Insulator to metal transition in compressed YH _x (x~3)	T. Matsuoka, H. Nugyen, Y. Nakagawa, K. Shimizu, Y. Nakamoto, T. Kagayama, Y. Ohishi, A. Machida, K. Aoki
2009/9/15	ポスター発表 平成 21 年度 G-COE 若手秋の学校「新しい量子物質・物性・機能の研究」	Transport properties of YH ₃ under high pressure and low temperature	Hyuen Nugyen, Chi Zhenhua、松岡岳洋、中川悠葵、加賀山朋子、清水克哉
2009/9/28	口頭発表 日本物理学会 2009 年秋季大会	GdFe ₂ 水素化物の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
2009/9/28	口頭発表 第 6 回 8 大学博士学生交流フォーラム	Transport properties of YH ₃ under high pressure and low temperature	Hyuen Nugyen, Chi Zhenhua、松岡岳洋、中川悠葵、加賀山朋子、清水克哉
2009/11/5	口頭発表 SPring-8 磁性分光研究会	高圧下 XMCD による 3d 遷移金属水素化物の研究	石松直樹, 松島康晴, 圓山裕, 圓谷貴夫, 小口多美夫, 竹村謙一, 松岡岳洋, 水牧仁一朗, 河

			村直己
2010/2/25	ポスター発表 JAEA-Symposium on Synchrotron Radiation Research 2010 – Material Science on Metal Hydride-	High-pressure structural and magnetic properties of iron hydride	平尾直久, 大石 泰生, 三井隆也, 瀬戸誠, 青木勝 敏, 竹村謙一
2010/2/25	ポスター発表 JAEA-Symposium on Synchrotron Radiation Research 2010 – Material Science on Metal Hydride-	Photoconductivity in compressed transparent Yttrium Hydride	Chi Zhenhua, Hyuen Nugyen, 木村圭太、松岡 岳洋、加賀山朋 子、清水克哉
2010/2/25	ポスター発表 JAEA-Symposium on Synchrotron Radiation Research 2010 – Material Science on Metal Hydride-	Magnetic state in iron hydride under pressure studied by X-ray magnetic circular dichroism at the Fe K-edge	N. Ishimatsu, T. Shichijo, Y. Matsushima, H. Maruyama, N. Kawamura, M. Mizumaki, T. Matsuoka, K. Takemura
2010/3/27-4/2	ポスター発表 SMEC2011	X-ray magnetic circular dichroism study on magnetic states in 3d transition metal (Fe, Co, Ni) hydrides under high pressure	N. Ishimatsu, T. Shichijo, Y. Matsushima, H. Maruyama, N. Kawamura, M. Mizumaki, T. Matsuoka, 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
2009/7/27	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	N.Ishimatsu R.Sasada H.Maruyama T.Ichikawa

		L-edges	H.Miyaoka T.Kimura M.Tsubota Y.Kojima T.Tsumuraya T.Oguchi N.Kawamura A.Machida
2009/9/7	口頭発表 第1回ミニ連携研究会「量子ビームを用いた高圧物性研究」	X線磁気円二色性(XMCD)による 圧力下の磁性研究: FeH の圧力下 磁性	石松直樹, 圓山 裕, 河村直己, 圓谷貴夫, 小口 多美夫, 竹村謙 一
2009/9/27	口頭発表 日本物理学会 秋季 大会	XMCD による鉄水素化物 FeH の 圧力下磁気状態の研究	石松直樹, 圓山 裕, 圓谷貴夫, 小口多美夫, 竹 村謙一, 河村直 己
2009/11/5	口頭発表 SPring-8 磁性分光研 究会	高圧下 XMCD による 3d 遷移金属 水素化物の研究	石松直樹, 松島 康晴, 圓山裕, 圓谷貴夫, 小口 多美夫, 竹村謙 一, 松岡岳洋, 水牧仁一朗, 河 村直己
2010/1/8	ポスター発表 第23回日本放射光学 学会年会	Fe K 端圧力下 XMCD による鉄水 素化物 FeH の磁気状態の研究	石松直樹, 圓山 裕, 圓谷貴夫, 小口多美夫, 竹 村謙一, 河村直 己
2010/2/25	ポスター発表 5th JAEA Symposium on Synchrotron Radiation Research	Magnetic state in iron hydride under pressure studied by X-ray magnetic circular dichroism at the Fe K-edge	N. Ishimatsu, Y. Matsushima, H. Maruyama, T. Tsumuraya, T. Oguchi, K. Takemura, T. Matsuoka,

			M. Mizumaki, N. Kawamura
2010/3/27-4/2	ポスター発表 SMEC2011	X-ray magnetic circular dichroism study on magnetic states in 3d transition metal (Fe, Co, Ni) hydrides under high pressure	N. Ishimatsu, T. Shichijo, Y. Matsushima, H. Maruyama, N. Kawamura, M. Mizumaki, T. Matsuoka, K. Takemura

(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
2009/11/30	ポスター発表 MRS Fall meeting2009	Raman and Visible Absorption Study of TbH3 Under High Pressure	T. Kume, N. Shimura, H. Shimizu, S. Sasaki, A. Machida, T. Watanuki, K. Aoki, K. Takemura
2010/2/25	ポスター発表 JAEA-Symposium on Synchrotron Radiation Research 2010 - Material Science on Metal Hydride-	Pressure induced phase transition of rare earth hydrides studied by Raman and absorption spectroscopy	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
2009/12/1	口頭発表 2009 MRS Fall meeting (Boston)	Local Structure and Transport Properties of $\text{Ca}_4\text{ZrH}_{10}$ Prepared under High Pressure	H. Takamura, T. Nakamura, S. Hashimoto H. Maekawa
2009/12/8	口頭発表 第 35 回固体イオニク ス討論会 (大阪)	蛍石型構造を有する金属水 素化物の電気伝導特性	高村仁, 黒須慶太, 中村崇昭, 橋本真 一, 前川英己
2010/2/25	ポスター発表 5th JAEA Symposium on Synchrotron Radiation Research – Material Science on Metal Hydride –	Observation of Hydrogen Absorption and Desorption Behavior of Metal Hydrides by in-situ NMR	H. Takamura, S. Hashimoto M. Ando, H. Maekawa

(計算科学 G : 産業技術総合研究所)

発表年月 日	大会名等	タイトル	発表者
2009.5.9	ナノ学会第 7 回大会 (東京) ポスター発表	水素貯蔵材料における P-C-T 曲線のモデル化	Vasileios Tserolas, 片 桐昌彦, 小川浩
2009.5.9	ナノ学会第 7 回大会 (東京) ポスター発表	V 基 BCC 水素貯蔵材料にお ける添加元素効果	田中喜典, Vasileios Tserolas, 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) ポスター発表	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) ポスター発表	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 (Sendai) ポスター発表	First principle study on BCC-type V-M hydrogen storage materials	Yoshinori Tanaka, Vasileios Tserolas, Hidehiro Onodera, Masahiko Katagiri, Hiroshi Ogawa
2009.5.11	4th UK-Japan Workshop on Solid-State Hydrogen Storage (Sendai) ポスター発表	Monte Carlo Simulation of Hydrogen Storage in RNi5 (R=rare earth)	Jun Nakamura, Yasushi Takeuchi, Masahiko Katagiri, Hiroshi Ogawa
2009.5.11	4th UK-Japan Workshop on Solid-State Hydrogen Storage (Sendai) ポスター発表	Theoretical study of phonon and thermodynamic properties of LaNi5-H	Shigeki Saito, Masahiko Katagiri, Hiroshi Ogawa
2009.6.1	Hydrogen + Fuel Cell 2009 (Vancouver, Canada) ポスター発表	Computer Simulation of Structural Stability of Hydrogen Storage Materials	Masahiko Katagiri, Hidehiro Onodera, Hiroshi Ogawa
2009.6.30	ICMAT 2009 & IUMRS - ICA 2009 (Singapore) ポスター発表	Structural Stability in Hydrogen-Storage Materials	Masahiko Katagiri, Hidehiro Onodera, Hiroshi Ogawa
2009.7.15	Gordon Research Conference - Hydrogen-Metal Systems (Lucca, Italy) ポスター発表	Simulation of Hydrogen Dynamics in Metallic Nanoparticles	Hiroshi Ogawa, Megumi Kayanuma and Tamio Ikeshoji
2009.9.3	Europacat IX (Salamanca, Spain) ポスター発表	Structural Stability in Hydrogen-Storage Materials: Role of Atomic Size Ratio in Hydrogen-Induced Amorphization	Masahiko Katagiri, Hidehiro Onodera, Hiroshi Ogawa
2009.9.17	日本金属学会 2009 年度秋期大会 (京都) 口頭発表	炭素系水素貯材料における窒素置換の影響	栢沼愛、池庄司民夫、小川浩
2009.9.17	日本金属学会 2009 年秋期大会 (京都) 口頭発表	First-principles study on thermodynamic stability of Ti-doped NaAlH ₄ surface	Hao Wang, Akinori Tezuka, Hiroshi Ogawa, Tamio Ikeshoji
2009.9.17	日本金属学会 2009 年秋期大会 (京都) 口頭発表	第一原理計算による LaNi ₅ 中の水素原子のポテンシャル場とその量子状態	金子智昭、手塚明則、小川浩、池庄司民夫
2009.10.13	Horiba-ISSP International Symposium (ISSP-11) "Hydrogen and water in condensed matter physics" (千葉県長生郡長柄町) ポスター発表	Potential energy profile of hydrogen in LaNi ₅ from first principles calculations and quantum mechanical state of hydrogen	Tomoaki Kaneko, Akinori Tezuka, Hiroshi Ogawa, and Tamio Ikeshoji

2009.10.13	Horiba-ISSP International Symposium (ISSP-11) "Hydrogen and water in condensed matter physics" (千葉県 長生郡長柄町) ポスター発表	First-Principles study on the structural and electronic properties in Ti- and Sc-doped NaAlH ₄	Hao Wang, Akinori Tezuka, Hiroshi Ogawa, Tamio Ikeshoji
2009.11.30	2009 MRS fall meeting (Boston) ポスター発表	Atomistic simulation on hydrogen storage in metallic nanoparticles	Hiroshi Ogawa, Megumi Kayanuma, Masahiko Katagiri
2009.12.1	第23回分子シミュレー ション討論会 (名古屋) ポスター発表	水素凝縮相-挿入金属原子系 の分子動力学シミュレーシ ョン	竹内靖, 片桐昌彦, 小野寺秀博, 小川浩 洋
2009.12.2	2009 MRS fall meeting (Boston) ポスター発表	Theoretical Study on N Doping in Carbon Materials for Hydrogen Storage	Megumi Kayanuma, Tamio Ikeshoji, Hiroshi Ogawa
2009.12.2	MRS 2009 fall meeting (Boston) ポスター発表	First principles study on thermodynamic stability and hydrogen atom hopping in NaAlH ₄	Hao Wang, Akinori Tezuka, Hiroshi Ogawa, Tamio Ikeshoji
2009.12.2	2009 MRS Fall Meeting (Boston) ポスター発表	First-Principles Calculations of Phonon and Thermodynamic Properties of Hydrogen Storage in LaNi ₅ -H	Shigeki Saito, Masahiko Katagiri, Vasileios Tserolas, Jun Nakamura, Hidehiro Onodera, Hiroshi Ogawa
2009.12.7	19th MRS-J Academic Symposium (Yokohama) ポスター発表	Thermodynamical Modeling of P-C Isotherms for Metal Hydride Materials	Vasileios Tserolas, Masahiko Katagiri, Hidehiro Onodera, Hiroshi Ogawa
2009.12.7	19th MRS-J Academic Symposium (Yokohama) ポスター発表	Pressure-Composition Isotherms with Monte Carlo Method for Hydrogen Storage RNi ₅ (R = rare earth)	Jun Nakamura, Shigeki Saito, Vasileios Tserolas, Yasushi Takeuchi, Masahiko Katagiri, Hiroshi Ogawa
2009.12.7	19th MRS-J Academic Symposium (Yokohama) ポスター発表	Effects of Metals on Hydrogen Interactions: Implications for Hydrogen-Storage Metals	Yasushi Takeuchi, Vasileios Tserolas, Shigeki Saito, Jun Nakamura, Masahiko Katagiri, Hidehiro Onodera, Hiroshi Ogawa
2009.12.7	19th MRS-J Academic Symposium (Yokohama) ポスター発表	A Clarification of Physical Properties of Interstitial Hydrogen in R-Ni ₅ by using First-Principles Phonon Calculations (R = La)	Shigeki Saito, Masahiko Katagiri, Vasileios Tserolas, Jun Nakamura, Yasushi Takeuchi, Hiroshi Ogawa

2010.1.12	The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Sendai) ポスター発表	Modeling of P-C Isotherms for hydrogen storage materials based on statistical thermodynamics	Vasileios Tserolas, Masahiko Katagiri, Hidehiro Onodera, Hiroshi Ogawa
2010.1.12	The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Sendai) ポスター発表	A Clarification of Phonon Properties of Interstitial Hydrogen in LaNi ₅	Shigeki Saito, Masahiko Katagiri, Vasileios Tserolas, Jun Nakamura, Yasushi Takeuchi, Hiroshi Ogawa, Hidehiro Onodera
2010.1.12	The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Sendai) ポスター発表	Energetics of Metals Containing High Concentrations of Hydrogen; A Molecular Dynamics Study	Yasushi Takeuchi, Vasileios Tserolas, Shigeki Saito, Jun Nakamura, Masahiko Katagiri, Hidehiro Onodera, Hiroshi Ogawa
2010.1.12	The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Sendai) ポスター発表	Monte Carlo Simulation of hydrogen storage ability in hydrogen storage materials	Jun Nakamura, Shigeki Saito, Vasileios Tserolas, Yasushi Takeuchi, Masahiko Katagiri, Hiroshi Ogawa
2010.1.14	The 4th General Meeting of Asian Consortium for Computational Materials Science-Virtual Organization (ACCMS-VO) (宮城県松島町) 口頭発表	First principles study on thermodynamic stability of and hydrogen atom hopping in NaAlH ₄	Hao Wang, Akinori Tezuka, Hiroshi Ogawa, Tamio Ikeshoji
2010.1.14	The 4th General Meeting of Asian Consortium for Computational Materials Science-Virtual Organization (ACCMS-VO) (宮城県松島町) 口頭発表	Quantum dynamics of hydrogen in LaNi ₅	Tomoaki Kaneko, Akinori Tezuka, Hiroshi Ogawa, and Tamio Ikeshoji
2010.1.14	The 4th General Meeting of Asian Consortium for Computational Materials Science-Virtual Organization (ACCMS-VO) (宮城県松島町) 口頭発表	Theoretical Study on Hydrogen Adsorption to Graphene-Like Compounds	Megumi Kayanuma, Tamio Ikeshoji, Hiroshi Ogawa

2010.2.25	JAEA-Symposium on Synchrotron Radiation Research 2010 (兵庫県佐用町) 口頭発表	Hydrogen Positions and Dynamics in Interstitials Observed by Computer Simulation	Hiroshi Ogawa
2010.3.2	5th Japan-China Seminar on Hydrogen Storage Materials (東京) ポスター発表	Theoretical study on hydrogen adsorption to N-substituted graphene-like compounds.	Megumi Kayanuma, Tamio Ikeshoji, Hiroshi Ogawa
2010.3.9	2nd OpenMX/QMAS workshop 2010 (東京) ポスター発表	Hopping path for hydrogen in LaNi5	Akinori Tezuka, Hao Wang, Hiroshi Ogawa, Tamio Ikeshoji
2010.3.9	2nd OpenMX/QMAS workshop 2010 (東京) ポスター発表	Quantum mechanical feature of hydrogen atom in LaNi5 and its effect on neutron scatterings	Tomoaki Kaneko, Akinori Tezuka, Hiroshi Ogawa, Tamio Ikeshoji
2010.3.17	APS March Meeting 2010 (Portland, USA) ポスター発表	Computer Simulation of Hydrogen Storage Capacity in Hydrogen Storage Materials	Masahiko Katagiri, Vasileios Tserolas, Shigeki Saito, Yasushi Takeuchi, Jun Nakamura, Hiroshi Ogawa
2010.3.29	日本金属学会 2010 年度春期大会 (つくば) 口頭発表	水素化に伴う金属ナノ粒子の構造変化に関するモデル計算	小川 浩、栢沼 愛、片桐昌彦
2010.3.29	日本金属学会 2010 年春期大会 (つくば) 口頭発表	分子動力学シミュレーションによる PdHx の自由エネルギー計算	竹内 靖、片桐昌彦、小野寺秀博、小川浩
2010.3.29	日本金属学会 2010 年春期大会 (つくば) 口頭発表	A Statistical Mechanics Model for Calculating P-C Isotherms of Hydrogen Storage Materials	Vasileios Tserolas, Masahiko Katagiri, Hidehiro Onodera, Hiroshi Ogawa

(計算科学G：物質・材料研究機構)

発表年月日	大会名等	タイトル	発表者
2009/5/9	ポスター発表 ナノ学会第7回大会、東京大学本郷キャンパス	第一原理計算によるRNi5-H (R = 希土類) の熱力学特性	片桐昌彦、齋藤繁喜
2009/5/9	ポスター発表 ナノ学会第7回大会、東京大学本郷キャンパス	第一原理ポテンシャルを基にしたDNAのフォノン計算	齋藤繁喜、水関博志、片桐昌彦、川添良幸
2009/5/9	ポスター発表 ナノ学会第7回大会、東京大学本郷キャンパス	水素貯蔵材料におけるP-C-T曲線のモデル化	Vasileios Tserolas、片桐昌彦、小川浩

2009/5/9	ポスター発表 ナノ学会第7回大会、東京大学本郷キャンパス	V基BCC水素貯蔵材料における 添加元素効果	田中喜典、 Vasileios Tserolas 小野寺秀博、 片桐昌彦、 小川浩
2009/5/11	ポスター発表 4th UK-Japan Workshop on Solid-State Hydrogen Storage, Sendai, Japan	First principle study on BCC-type V-M hydrogen storage materials	Yoshinori Tanaka, Vasileios Tserolas, Hidehiro Onodera, Masahiko Katagiri, Hiroshi Ogawa
2009/5/11	ポスター発表 4th UK-Japan Workshop on Solid-State Hydrogen Storage, Sendai, Japan	Monte Carlo Simulation of Hydrogen Storage in RNi5 (R=rare earth)	Jun Nakamura, Yasushi Takeuchi, Masahiko Katagiri, Hiroshi Ogawa
2009/5/11	ポスター発表 4th UK-Japan Workshop on Solid-State Hydrogen Storage, Sendai, Japan	Theoretical study of phonon and thermodynamic properties of LaNi5-H	Shigeki Saito, Masahiko Katagiri, Hiroshi Ogawa
2009/6/1	ポスター発表 Hydrogen + Fuel Cell 2009, Vancouver, Canada	Computer Simulation of Structural Stability of Hydrogen Storage Materials	Masahiko Katagiri, Hidehiro Onodera, Hiroshi Ogawa
2009/6/1	ポスター発表 Hydrogen + Fuel Cell 2009, Vancouver, Canada	A Simple Model for Simulating P-C-T Curves of Hydrogen Storage Materials	Vasileios Tserolas, Masahiko Katagiri
2009/6/30	ポスター発表 ICMAT 2009 & IUMRS - ICA 2009, Singapore	Structural Stability in Hydrogen-Storage Materials	Masahiko Katagiri, Hidehiro Onodera, Hiroshi Ogawa
2009/6/30	ポスター発表 ICMAT 2009 & IUMRS - ICA 2009, Singapore	First principles calculation of phonon and thermodynamic properties of LaNi5-H	Masahiko Katagiri, Shigeki Saito
2009/6/30	ポスター発表 ICMAT 2009 & IUMRS - ICA 2009, Singapore	Modeling of Pressure-Composition-Temperature Curves for Hydrogen Storage Materials	Vasileios Tserolas Masahiko Katagiri
2009/9/3	ポスター発表 Europacat IX, Salamanca, Spain	Phonon and thermodynamic properties of LaNi5-H: First principles calculations	Masahiko Katagiri, Shigeki Saito

2009/9/3	ポスター発表 Europacat IX, Salamanca, Spain	Structural Stability in Hydrogen-Storage Materials: Role of Atomic Size Ratio in Hydrogen -Induced Amorphization	Masahiko Katagiri, Hidehiro Onodera, Hiroshi Ogawa
2009/9/3	ポスター発表 Europacat IX, Salamanca, Spain	A Modeling Study for Calculating Pressure-Composition Isotherms of Hydrogen Storage Materials	Vasileios Tserolas Masahiko Katagiri
2009/12/1	ポスター発表 第23回分子シミュレー ション討論会、名古屋 市中小企業振興会館	水素凝縮相-挿入金属原子系の分 子動力学シミュレーション	竹内靖、 片桐昌彦、 小野寺秀博、 小川浩
2009/12/2	ポスター発表 2009 MRS Fall Meeting, Boston, USA	First-Principles Calculations of Phonon and Thermodynamic Properties of Hydrogen Storage a-LaNi ₅ -H	Masahiko Katagiri, Shigeki Saito
2009/12/2	ポスター発表 2009 MRS Fall Meeting, Boston, USA	The Application of Modeling to the Calculation of the P-C Isotherms for Hydrogen Storage Materials	Vasileios Tserolas Masahiko Katagiri, Hidehiro Onodera, Hiroshi Ogawa
2009/12/2	ポスター発表 2009 MRS Fall Meeting, Boston, USA	A Molecular-Dynamics Study on Metal-Immersed Hydrogen Fluids	Yasushi Takeuchi, Masahiko Katagiri, Hidehiro Onodera
2009/12/7	口頭発表 19th MRS-J Academic Symposium, Yokohama, Japan	Thermodynamical Modeling of P-C Isotherms for Metal Hydride Materials	Vasileios Tserolas Masahiko Katagiri, Hidehiro Onodera, Hiroshi Ogawa
2009/12/7	ポスター発表 19th MRS-J Academic Symposium, Yokohama, Japan	Pressure-Composition Isotherms with Monte Carlo Method for Hydrogen Storage RNi ₅ (R = rare earth)	Jun Nakamura, Shigeki Saito, Vasileios Tserolas Yasushi Takeuchi, Masahiko Katagiri, Hiroshi Ogawa
2009/12/7	ポスター発表 19th MRS-J Academic Symposium, Yokohama, Japan	Effects of Metals on Hydrogen Interactions: Implications for Hydrogen-Storage Metals Materials	Yasushi Takeuchi, Vasileios Tserolas Shigeki Saito, Jun Nakamura, Masahiko Katagiri, Hidehiro Onodera, Hiroshi Ogawa
2009/12/7	ポスター発表 19th MRS-J Academic Symposium, Yokohama, Japan	A Clarification of Physical Properties of Interstitial Hydrogen in R-Ni ₅ by using First-Principles Phonon Calculations (R = La)	Shigeki Saito, Masahiko Katagiri, Vasileios Tserolas Jun Nakamura, Yasushi Takeuchi, Hiroshi Ogawa

2010/1/12	ポスター発表 The Fourth General Meeting of ACCMS-VO, Sendai, Matsushima, Japan	Modeling of P-C Isotherms for hydrogen storage materials based on statistical thermodynamics	Vasileios Tserolas Masahiko Katagiri, Hidehiro Onodera, Hiroshi Ogawa
2010/1/12	ポスター発表 The Fourth General Meeting of ACCMS-VO, Sendai, Matsushima, Japan	A Clarification of Phonon Properties of Interstitial Hydrogen in LaNi ₅	Shigeki Saito, Masahiko Katagiri, Vasileios Tserolas Jun Nakamura, Yasushi Takeuchi, Hiroshi Ogawa, Hidehiro Onodera
2010/1/12	ポスター発表 The Fourth General Meeting of ACCMS-VO, Sendai, Matsushima, Japan	Energetics of Metals Containing High Concentrations of Hydrogen; A Molecular Dynamics Study	Yasushi Takeuchi, Vasileios Tserolas Shigeki Saito, Jun Nakamura, Masahiko Katagiri, Hidehiro Onodera, Hiroshi Ogawa
2010/1/12	ポスター発表 The Fourth General Meeting of ACCMS-VO, Sendai, Matsushima, Japan	Monte Carlo Simulation of hydrogen storage ability in hydrogen storage materials	Jun Nakamura, Shigeki Saito, Vasileios Tserolas Yasushi Takeuchi, Masahiko Katagiri, Hiroshi Ogawa
2010/2/25	ポスター発表 第5回JAEA放射光科学研究シンポジウム、兵庫県佐用郡佐用町 SPring-8	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	片桐昌彦
2010/3/17	ポスター発表 APS March Meeting 2010, Portland, Oregon, USA	Computer Simulation of Hydrogen Storage Capacity in Hydrogen Storage Materials	Masahiko Katagiri, Vasileios Tserolas Shigeki Saito, Yasushi Takeuchi, Jun Nakamura, Hiroshi Ogawa
2010/3/28	口頭発表 10th International Conference on Computational & Experimental Engineering and Sciences (ICCES'10), Las Vegas, USA	First Principles Calculations of Phonon and Thermodynamic Properties of LaNi ₅ H _n (n=0~7)	Shigeki Saito, Masahiko Katagiri, Vasileios Tserolas Jun Nakamura, Hidehiro Onodera, Hiroshi Ogawa
2010/3/29	口頭発表 日本金属学会2010年春季大会、筑波大学筑波キャンパス	分子動力学シミュレーションによるPdH _x の自由エネルギー計算	竹内 靖、 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)

発表年月日	大会名等	タイトル	発表者
平成 21 年 4 月 11 日	4th China-Japan Seminar on Hydrogen Storage Materials (口頭発表)	Theoretical Research for Improved Hydrogen Storage Materials	H. Mizuseki, N. S. Venkataramanan, R. Sahara, and Y. Kawazoe
平成 21 年 5 月 12 日	4th UK - Japan Workshop on Solid-State Hydrogen Storage (口頭発表)	Computational Materials Design for Improved Hydrogen Storage Materials	Y. Kawazoe and H. Mizuseki
平成 21 年 5 月 15 日	金属材料研究所第 117 回講演会 (口頭発表)	第一原理計算による水素貯蔵材料研究	水関博志
平成 21 年 9 月 9 日	The 5th Conference of Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-5) (招待講演)	Phase Behavior Predictions of Various Methane and Hydrogen Clathrate Hydrates	V. R. Belosludov
平成 21 年 9 月 17 日	金属学会秋期講演大会 (口頭発表)	First Principles Calculations on Hydrogen Storage Properties of MOFs, Organic Hosts, and BN Fullerenes	N. S. Venkataramanan、水関博志、佐原亮二、川添良幸
平成 21 年 11 月 30 日	MRS Fall 2009 (口頭発表)	First Principles Calculations on Storage Capacity of Hydrogen Storage Materials	H. Mizuseki, N. Venkataramanan, R. Sahara, and Y. Kawazoe
平成 21 年 12 月 7 日	MRS-J (口頭発表)	全電子混合基底法プログラム TOMBO による水素貯蔵材料 MOF の結合エネルギー評価	佐原亮二、水関博志、大野かおる、M.H.F. Sluiter、川添良幸
平成 22 年 1 月 14 日	ACCMS-VO4 (招待講演)	Investigation of Hydrogen Storage in Carbon based Nanostructures Coated with Light Weight Hydride, BH3	K. Iyakutti, V. J. Surya, I. Lakshmi, N. S. Venkataramanan, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
平成 22 年 1 月 14 日	ACCMS-VO4 (招待講演)	Extended Low-Frequency Vibrations of Hydrogen-Bond Networks of Amorphous Ices	V. R. Belosludov
平成 22 年 3 月 29 日	日本金属学会 (口頭発表)	第一原理計算によるアルカリ金属をドーピングした材料の水素貯蔵性能評価	水関博志、Natarajan S. Venkataramanan、陳剛、M. Khazaei、佐原亮二、川添良幸
平成 22 年 3 月 29 日	日本金属学会 (口頭発表)	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、水関博志、Marcel H. F. Sluiter、大野かおる、川添良幸
平成 21 年 5 月 9 日	ナノ学会第 7 回大会 (ポスター発表)	Electronic Structure of Defected Graphane Structures	M. Khazaei, M. S. Bahramy, H. Mizuseki, and Y. Kawazoe

平成 21 年 5 月 9 日	ナノ学会第 7 回大会 (ポスター発表)	Hydrogen Storage on Organic Hosts	N. S. Venkataramanan, R. Sahara, H. Mizuseki, and Y. Kawazoe
平成 21 年 5 月 9 日	ナノ学会第 7 回大会 (ポスター発表)	Theoretical Search for the Potential Hydrogen Storage Medium	G. Chen, H. Mizuseki, and Y. Kawazoe
平成 21 年 5 月 9 日	ナノ学会第 7 回大会 (ポスター発表)	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, and Y. Kawazoe
平成 21 年 5 月 10 日	ナノ学会第 7 回大会 (ポスター発表)	Ab initio Study of the Alkali-Metal Doped BN Fullerene as Hydrogen Storage Materials	N. S. Venkataramanan, R. Sahara, H. Mizuseki, and Y. Kawazoe
平成 21 年 5 月 11 日	ナノ学会第 7 回大会 (ポスター発表)	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
平成 21 年 5 月 11 日	4th UK - Japan Workshop on Solid-State Hydrogen Storage (ポスター発表)	Ab initio Study of the Alkali-Metal Doped BN Fullerene as Hydrogen Storage Materials	N. S. Venkataramanan, R. Sahara, H. Mizuseki, Y. Kawazoe
平成 21 年 5 月 11 日	4th UK - Japan Workshop on Solid-State Hydrogen Storage (ポスター発表)	Hydrogen Storage in Clathrate Hydrate: Theoretical Aspects	R. V. Belosludov, O. S. Subbotin, H. Mizuseki, V. R. Belosludov, and Y. Kawazoe
平成 21 年 5 月 11 日	4th UK - Japan Workshop on Solid-State Hydrogen Storage (ポスター発表)	Theoretical Search for the Potential Hydrogen Storage Medium	G. Chen and Y. Kawazoe
平成 21 年 5 月 11 日	4th UK - Japan Workshop on Solid-State Hydrogen Storage (ポスター発表)	Theoretical Study on Metal Organic Frameworks by All-Electron Mixed-Basis Program TOMBO	R. Sahara, H. Mizuseki, K. Ohno, M. Sluiter, and Y. Kawazoe
平成 21 年 6 月 11 日	E-MRS (ポスター発表)	Theoretical Study on Metal Organic Frameworks by All-Electron Mixed-Basis Program TOMBO	R. Sahara, O. Kikegawa, H. Mizuseki, K. Ohno, M. Sluiter, and Y. Kawazoe
平成 21 年 8 月 16 日	ACS (ポスター発表)	Ab initio Study of the Alkali Metal Doped BN Fullerene as Hydrogen Storage Material	N.S. Venkataramanan, R. Sahara, H. Mizuseki, and Y. Kawazoe
平成 21 年 9 月 1 日	DFT09 (ポスター発表)	Binding Energy Estimation of Hydrogen Storage Materials MOF by All-Electron Mixed-Basis Program TOMBO	R. Sahara, H. Mizuseki, K. Ohno, M. Sluiter, and Y. Kawazoe
平成 21 年 9 月 9 日	The 5th Conference of Asian Consortium on Computational Materials	Influence of Methane Content on Clathrate Hydrate Structure	O. S. Subbotin, V. R. Belosludov, R. V. Belosludov, H.

	Science (ACCMS-5) (ポスター発表)	Transformation sI - sII	Mizuseki, and Y. Kawazoe
平成 21 年 9 月 9 日	The 5th Conference of Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-5) (ポスター発表)	Binding Energy Estimation of Hydrogen Storage Materials by All-Electron Mixed-Basis Program TOMBO	R. Sahara, H. Mizuseki, K. Ohno, M. Sluiter, and Y. Kawazoe
平成 21 年 9 月 9 日	The 5th Conference of Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-5) (ポスター発表)	Theoretical Investigation of the Hydrogen Storage Ability of a Carbon Nanohorn	G. Chen, Q. Peng, H. Mizuseki, and Y. Kawazoe
平成 21 年 9 月 9 日	The 5th Conference of Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-5) (ポスター発表)	Density Functional Study on the Alkali Atom Doped Calix[4]arene as Hydrogen Storage Material	N.S. Venkataramanan, R. Sahara, H. Mizuseki, and Y. Kawazoe
平成 21 年 11 月 26 日	東北大学・金属材料研究所講演会 (ポスター発表)	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、水関博志、Marcel H. F. Sluiter、大野かおる、川添良幸
平成 21 年 11 月 26 日	東北大学・金属材料研究所講演会 (ポスター発表)	Theoretical Investigation of Hydrogen Storage Ability of a Carbon Nanohorn	G. Chen, Q. Peng, H. Mizuseki, and Y. Kawazoe
平成 21 年 12 月 2 日	MRS Fall 2009 (ポスター発表)	Theoretical Study of Hydrogen Storage in Clathrate Hydrate	R. Belosludov, O. Subbotin, H. Mizuseki, V. Belosludov, and Y. Kawazoe
平成 22 年 1 月 12 日	ACCMS-VO4 (ポスター発表)	Theoretical Study on Metal Organic Frameworks by All-Electron Mixed-Basis Program TOMBO	R. Sahara, H. Mizuseki, K. Ohno, M. Sluiter, and Y. Kawazoe
平成 22 年 1 月 12 日	ACCMS-VO4 (ポスター発表)	Theoretical Study of Hydrogen Clathrate Hydrate: Hydrogen Storage	R. V. Belosludov, O. S. Subbotin, H. Mizuseki, V. R. Belosludov, and Y. Kawazoe
平成 22 年 1 月 12 日	ACCMS-VO4 (ポスター発表)	Chemical Engineering of Prehydrogenated C and BN-Sheets by Li: Application in Hydrogen Storage	M. Khazaei, M. S. Bahramy, N. S. Venkataramanan, H. Mizuseki, and Y. Kawazoe
平成 22 年 1 月 12 日	ACCMS-VO4 (ポスター発表)	Hydrogen Adsorption on Ni-Interstitial Metal Hydrides: A Cluster Approach	N. S. Venkataramanan, R. Sahara, H. Mizuseki, Y. Kawazoe
平成 22 年 3 月 2 日	第 5 回 日中水素貯蔵材料セミナー (ポスター発表)	Theoretical Study on Alkali Atom Doping to Enhance the Storage Capacity of Materials	H. Mizuseki, N. S. Venkataramanan, G. Chen, R. Sahara, and Y. Kawazoe
平成 22 年 3 月 2 日	第 5 回 日中水素貯蔵材料セミナー (ポスター発表)	Theoretical Study of Hydrogen Storage Materials by All-electron	R. Sahara, H. Mizuseki, M. Sluiter, K. Ohno, and Y.

	表)	Mixed-basis Method	Kawazoe
平成 22 年 3 月 4 日	次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発 第 4 回 公開シンポジウム (ポスター発表)	Quantum Chemical Studies on the Hydrogen Storage of Calixarene	N. S. Venkataramanan, R. Sahara, H. Mizuseki, and Y. Kawazoe
平成 22 年 3 月 10 日	次世代スパコン物性科学分野研究会「新物質・エネルギー創成」(ポスター発表)	第一原理計算による持続可能なエネルギー材料評価	水関博志、N. S. Venkataramanan、陳剛、R. V. Belosludov、A. Suvitha、佐原亮二、川添良幸
平成 22 年 3 月 10 日	次世代スパコン物性科学分野研究会「新物質・エネルギー創成」(ポスター発表)	全電子混合基底法プログラム TOMBO を用いた水素貯蔵材料の開発	佐原亮二、水関博志、Marcel Sluiter、大野かおる、川添良幸

(中性子 G : 高エネルギー加速器研究機構)

発表日	学会名等	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
2009/7/1	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
2009/8/7	口頭発表 東京大学物性研究所・拡大IRT研究会シリーズ「構造解析討論会: 装置の立場からみた構造解析の将来像」 --- 三号炉の今と 5 年後 / J-PARC の今と 5 年後 ---	NOVA の現状と 5 年後- 水素系・金属ガラス・液体	大友季哉
2009/8/28	口頭発表 第一回連携研究会 - 筑波大学数理物	中性子全散乱装置による水素貯蔵材料の研究	大友季哉

	質科学研究科とKEK 物質構造科学研究所の連携を目指して-		
2009/9/17	口頭発表 日本金属学会 秋季大会	中性子全散乱装置による水素 貯蔵材料の構造研究	大友 季哉、三沢 正勝、金子直勝、 大下英敏、鈴谷 賢太郎、福永俊 晴、伊藤恵司
2009/9/25	口頭発表 日本物理学会 秋期大会	J-PARC高強度全散乱装置 (NOVA)用の中性子ビームモニ ターの開発	大下英敏、宇野 彰二、大友季哉、 内田智久、小池 貴久、村上武、 関本美知子、
2009/10/25	口頭発表 IEEE Nuclear Science Symposium	Performance of a Neutron Beam Monitor with a GEM for the High-Intensity Total Diffractometer at J-PARC	大下英敏、大友 季哉、宇野彰二、 内田智久、小池 貴久、村上武、 関本美知子、
2009/11/12	口頭発表 日本表面科学 会 主催・第30回表面 科学セミナー「グリーン テクノロジー、表面科学 の新たな挑戦」	高強度中性子散乱による水素 貯蔵放出メカニズム研究	大友季哉
2009/11/17	ポスター発表 物構研シ ンポジウム	J-PARC高強度全散乱装置 (NOVA)のコミッショングと 水素貯蔵材料研究計画	大下英敏、大友 季哉、三沢正勝、 金子直勝、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、千代浩司、 武藤豪、猪野隆、 伊藤晋一、横尾 哲也、上野、鈴 谷賢太郎、社本 真一、高田慎一、 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
2009/12/4	口頭発表 LANL-NEDO-AIST workshop	High Intensity Total Scattering Instrument (NOVA) for Hydrogen Storage Materials	大友季哉
2009/12/9	ポスター発表 日本中性 子学会	J-PARC高強度全散乱装置 (NOVA)のデータ解析システム	大友季哉、大下英敏、三沢正勝、金子直勝、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、鈴谷賢太郎、社本真一、高田慎一、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
2009/12/9	ポスター発表 日本中性 子学会	J-PARC高強度全散乱装置 (NOVA)のコミッションング	大下英敏、大友季哉、三沢正勝、金子直勝、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、鈴谷賢太郎、社本真一、高田慎一、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
2009/12/11	口頭発表 J-PARC MLF 利用者懇談会 液体・非晶質材料分科会ユーザーミーティング	高強度全散乱装置(NOVA)のコミッションング	大友季哉
2009/12/18	口頭発表 第3回 水素貯蔵材料先端基盤研究事業技術検討会議	中性子グループ報告「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
2009/12/18	ポスター発表 第3回 水素貯蔵材料先端基盤研究事業技術検討会議	J-PARC高強度全散乱装置(NOVA)のコミッションング	大下英敏、大友季哉、三沢正勝、金子直勝、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、鈴谷賢太郎、社本真一、高田慎一、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
2009/12/18	ポスター発表 第3回 水素貯蔵材料先端基盤研究事業技術検討会議	NOVAにおけるデータ解析ソフトウェア開発	伊藤恵司、大友季哉、大下英敏、三沢正勝、金子直勝、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、 鈴谷賢太郎、社 本真一、高田慎 一、福永俊晴、 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
2010/1/13	口頭発表 九州大学理学 研究院物理学部門 教 室談話会	パルス中性子源を用いた水素 貯蔵メカニズムの構造研究	大友季哉
2010/2/9	口頭発表 東北大学金属 材料研究所中性子散乱 研究会シリーズ第2回 「中性子を用いた新し いマテリアルサイエン スの検討」	J-PARC高強度全散乱装置 NOVAの現状	鈴谷賢太郎
2010/2/15	口頭発表 THE 12th VIENNA CONFERENCE ON INSTRUMENTATION- VCI2010	Commissioning test of a neutron beam monitor for the high-intensity total diffractometer at J-PARC	大友季哉、大下 英敏、宇野彰二 、小池貴久、村 上武、関本美知 子、内田智久
2010/3/20	口頭発表 日本物理学会 第65回年次大会	J-PARC 高強度全散乱装置 (NOVA) のコミッショニング	大下英敏,大友 季哉、三沢正勝、 金子直勝、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、鈴谷賢太 郎、社本真一、 高田慎一、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
2010/3/27	口頭発表 NEDO 水素 貯蔵材料関連プロジェ クト連携成果報告会	中性子全散乱装置NOVAによ る水素貯蔵材料のキャラクタ リゼーション	大友季哉
2010/3/27	ポスター発表 NEDO 水素貯蔵材料関連プロ ジェクト連携成果報告 会	NOVAによるV-D2の中性子回 折測定	伊藤恵司、大友 季哉、大下英敏、 鈴谷賢太郎
2010/3/27	ポスター発表 NEDO 水素貯蔵材料関連プロ ジェクト連携成果報告 会	NOVAによるH2O/D2Oの中性 子回折測定	亀田 恭男、山口 敏男、吉田亨次、 伊藤恵司、福永 俊晴、丸山健二、 川北至信、大友 季哉、大下英敏、 金子直勝、鈴谷 賢太郎

平成22年度【307件（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
2010/4/8	Electronic Journal 第478回 Technical Seminar 講演	水素貯蔵材料の基礎と応用	秋葉 悦男
2010/4/14	IEA HIA Task 22 meeting 講演	Synthesis and characterization of novel metal hydrides	秋葉 悦男、Shao Huaiyu、松田 潤子、中村仁、中村 優美子、T. ProffenH-J. Kim
2010/4/26	平成22年度総会特別講演会（第131回定例研究会）講演	HYDRO-STAR（水素貯蔵材料先端基盤研究事業）の進捗状況	秋葉 悦男
2010/5/19	The 18th World Hydrogen Energy Conference 2010 講演	Metal Hydrides	秋葉 悦男
2010/5/26	日本顕微鏡学会第66回学術講演会 講演	Ti-V-Mn系BCC固溶体合金の水素吸蔵放出特性と組織変化	松田 潤子、浅野 耕太、中村 優美子、秋葉 悦男
2010/5/27	第5回環境調和型水素製造システムにおける生成と吸蔵貯蔵の一体化研究会 講演	水素貯蔵材料の現状と将来展望	秋葉 悦男
2010/6/3	US-Japan Workshop on Basic Science Project Development 講演	Overview of AIST-LANL Collaboration on Hydrogen Storage Materials	秋葉 悦男
2010/6/16	5th Forum on New Materials 講演	Hydrogen storage materials - recent development and future strategy of Japan	秋葉 悦男
2010/6/27	Renewable Energy 2010 講演	EVAPORATION-MODERATING EFFECT OF HELIUM ATMOSPHERE DURING MELTING METAL HYDRIDE CONTAINING LIGHT ELEMENTS	松本 愛子、中村 優美子、秋葉 悦男
2010/7/1	Renewable energy 2010	Thermal stability of hydrogen and	榑 浩司、中村 優美

	講演	vacancy in Ti-Cr-Mo alloy	子、秋葉 悦男
2010/7/1	再生可能エネルギー国際会議 (RE2010) 講演	水素エネルギー技術研究における国際協力	中村 優美子
2010/7/9	日本真空協会関西支部 & 日本表面科学会関西支部合同セミナー2010 講演	水素貯蔵材料の研究開発最前線	秋葉 悦男
2010/7/16	第10回日立ナノテクパーク21 講演	TEMによる水素貯蔵合金の微構造解析	松田 潤子
2010/7/19	International symposium on Metal-Hydrogen systems MH2010 ポスター発表	Lattice strain formation in Ti-V-Mn during the first absorption and desorption	山崎 幸春、中村仁、榑 浩司、中村 優美子、秋葉 悦男
2010/7/19	International Symposium on Metal-Hydrogen Systems MH2010 ポスター発表	Site occupation and diffusion of hydrogen in $V_{1-x}Mox-H$ ($0 \leq x \leq 0.1$) monohydride phases studied by 1H NMR	浅野 耕太、林 繁信、中村 優美子、秋葉 悦男
2010/7/20	International Symposium on Metal-Hydrogen Systems MH2010 ポスター発表	Hydrogen Absorbing Property of Ti-Fe-Al Alloys	松田 潤子、中村 優美子、秋葉 悦男
2010/7/20	International symposium on Metal-Hydrogen systems MH2010 講演	Structural Studies of Hydrogen Storage Materials using Total Scattering and the PDF Method	中村 優美子、中村仁、Kim Hyunjeong、Thomas Proffen、秋葉 悦男
2010/7/20	International symposium on Metal-Hydrogen systems MH2010 講演	Dependence of the chemical composition on the crystal structure of $Mg_{2-x}RE_xNi_4$ (RE: La, Pr, Nd, Sm, Gd, $x=0.6, 1.0$) hydride	榑 浩司、寺下尚克、角掛繁、中村 優美子、秋葉 悦男
2010/7/20	International symposium on Metal-Hydrogen systems MH2010 ポスター発表	Hydrogenation properties of the ternary compounds $Mg_{2-x}Pr_xNi_4$ and $MgRENi_4$	寺下尚克、榑 浩司、中村 優美子、中村仁、角掛繁、秋葉 悦男
2010/8/4	第2回茨城県水素・燃料電池研究会 講演	産業技術総合研究所における取り組み	秋葉 悦男
2010/8/17	5th LANL-NEDO-AIST	HYDRO-STAR Project	秋葉 悦男

	Workshop for Hydrogen Storage 講演		
2010/8/18	The 5th LANL-NEDO-AIST Workshop for Hydrogen 講演	Positron annihilation study for hydrogen storage materials	榑 浩司、中村 優美子、秋葉 悦男
2010/8/19	5th LANL-NEDO-AIST Workshop for Hydrogen Storage 講演	AIST-LANL Collaboration: Structural Studies of Hydrogen Storage Materials using Total Scattering and the PDF Method	中村 優美子、中村 仁、榑 浩司、Kim Hyunjeong、Thomas Proffen、秋葉 悦男
2010/9/1	福岡水素エネルギー人材育成センター「高度人材育成コース」 講演	水素貯蔵材料研究の最前線	秋葉 悦男
2010/9/25	日本金属学会 2010 年秋期大会 講演	走査型プローブ顕微鏡による繊維状 MgH ₂ の水素放出その場観察	松本 愛子、松田 潤子、榑 浩司、中村 優美子、秋葉 悦男
2010/9/26	日本金属学会 2010 年秋期大会 講演	TiVMn の一回目水素化、脱水素化にともなう相および格子ひずみの変化	山崎 幸春、榑 浩司、中村 優美子、秋葉 悦男
2010/9/26	日本金属学会 2010 年秋期大会 講演	C15b 型 ラーベス 相 合 金 Mg _{0.8} Pr _{1.2} Ni ₄ の水素貯蔵特性と水素誘起アモルファス化	榑 浩司、寺下尚克、Kim Hyunjeong、Thomas Proffen、中村 優美子、秋葉 悦男
2010/9/26	日本金属学会 2010 年秋期大会 講演	In-situ 中性子回折測定による La ₂ Ni ₇ Dx の結晶構造変化	岩瀬謙二、星川晃範、石垣徹、榑 浩司、中村 優美子、秋葉 悦男
2010/9/27	日本金属学会 2010 年秋期大会 講演	固体 NMR を用いたボロハイドライドのダイナミクス解析	治村 圭子、林 繁信
2010/9/27	日本金属学会 2010 年秋期大会 講演	固体 NMR を用いたバナジウム重水素化物(D/M=0.5)の電子構造	鈴木 陽、林 繁信
2010/10/6	Joint Final Event of the European Integrated Project NESSHY and COSY 講演	Research and Development of Hydrogen Storage Materials in Japan - From Fundamentals to Applications	秋葉 悦男

2010/10/22	KRI クライアントコンファレンス&ワークショップ'10 講演	水素エネルギーとその活用	秋葉 悦男
2010/11/15	第49回NMR討論会 ポスター発表	アルカリボロハイドライドにおけるイオンのダイナミクス	治村 圭子、林 繁信
2010/12/2	平成22年度産総研環境・エネルギーシンポジウムシリーズ3エネルギー技術シンポジウム2010 ポスター発表	水素貯蔵材料の研究開発	浅野 耕太、中村 優美子、榎 浩利、松田 潤子、榊 浩司、松本 愛子、秋葉 悦男
2010/12/17	Pacificchem 2010	Mg-TM (TM = Ti and Co) alloys: preparation, hydrogenation and characterization	秋葉 悦男、浅野 耕太、Shao Huaiyu、榎 浩利、Kim Hyunjeong、Proffen Thomas、中村 優美子
2010/12/18	2010 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies ポスター発表	Quantification of H content in hydrogen storage materials using solid-state NMR	鈴木 陽、林 繁信
2010/12/18	2010 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies ポスター発表	Hydrogen dynamics in sodium borohydride as studied by solid-state NMR	治村 圭子、林 繁信
2010/12/19	2010 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 講演	Study of phase structure in V-D systems using 1H, 2H and 51V NMR spectra	鈴木 陽、林 繁信
2011/3/1	水素貯蔵材料フォーラム2011	HYDRO-STAR の最新状況	秋葉悦男
2011/3/9	The 1st International Symposium on Advanced Nanostructured Materials for Clean Energy (ANMCE, 2011) 講演	Structures and hydrogenation properties of hydrogen storage alloys	中村 優美子、山崎 宰春、中村仁、岩瀬 謙二、榊 浩司

(非金属系 G : 広島大学)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2010/4/5-8	Oral MRS 2010 spring meeting (San Francisco, USA)	Hydrogen desorption from lithium hydride and ammonia as hydrogen storage system	T. Ichikawa A. Yamane F. Shimojo K. Hoshino Y. Kojima
2010/4/8-9	Oral IPHE Workshop (PNNL, USA)	Basic Research of Hydride-Ammonia Borane System	Y. Kojima
2010/4/11-15	Oral IEA HIA Expert MEETING (USA)	Basic Research of Non-Metalic Hydrogen Storage Materials	Y. Kojima
2010/5/10-11	ポスター発表 固体 NMR・材料フォーラム(神戸製鋼所 神戸総合技術研究所、兵庫)	Structural Changes on Hydrogen Storage Material $\text{LiAl}(\text{NH}_2)_2$ by Thermal Decomposition: NMR Study	小野泰輔、下田景士、坪田雅己、市川貴之、小島由継、丹所正孝、清水禎
2010/5/16-21	Poster 18 th World Hydrogen Energy Conference (Germany)	Chemical Hydrogen Compression by MH-NH_3 System	T. Ichikawa H. Miyaoka Y. Kojima
2010/6/13-18	Poster CIMTEC 2010 5 th Forum on New Materials (Montecatini Terme, Italy)	Solid State NMR Investigation of $\text{LiAl}(\text{NH}_2)_2$ on Thermal Decomposition	T. Ono K. Shimoda M. Tsubota T. Ichikawa Y. Kojima
2010/6/13-18	Poster CIMTEC 2010 5 th Forum on New Materials (Montecatini Terme, Italy)	The Rate Determining Steps of Catalyzed Mg on Hydrogen Absorption and Desorption Reactions	T. Kimura M. Tsubota S. Isobe S. Hino T. Ichikawa Y. Kojima
2010/6/27-30	Oral 5 th International Ege Energy Symposium and Exhibittion (Pamukkale University, Trukey)	Hydrogen Production via Direct Reaction of Ammonia and Metal Hydride	H. Miyaoka T. Ichikawa S. Hino M. Tsubota Y. Kojima
2010/7/19-23	Oral	Cluster size dependence of	A. Yamane

	MH2010 -International Symposium- (Moscow University, Russia)	hydrogen desorption from alkali metal hydride and ammonia	F. Shimojo K. Hoshino T. Ichikawa Y. Kojima
2010/7/19-23	Poster MH2010 -International Symposium- (Moscow University, Russia)	Specific heat capacity of LiNH_2	B. Paik M. Tsubota T. Ichikawa Y. Kojima
2010/7/19-23	Poster MH2010 -International Symposium- (Moscow University, Russia)	Synthesis and characterization of metal aluminum amides	T. Ono K. Shimoda M. Tsubota S. Hino K. Kojima T. Ichikawa Y. Kojima
2010/7/19-23	Poster MH2010 -International Symposium- (Moscow University, Russia)	Catalytically Enhanced Dehydrogenation of Hydride-Amidoborane Composite Materials for Hydrogen Storage	Y. Zhang K. Shimoda T. Ichikawa Y. Kojima
2010/7/19-23	Poster MH2010 -International Symposium- (Moscow University, Russia)	Catalytic Effect of Li_5TiN_3 on Hydrogen Desorption Properties in the Mechanically Ball Milled Li-N-H System	Y. Teng T. Ichikawa S. Hino Y. Kojima
2010/7/19-23	Poster MH2010 -International Symposium- (Moscow University, Russia)	An investigation of liquid ammonia electrolysis for hydrogen storage	B. Dong N. Hanada T. Ichikawa S. Hino H. Suzuki K. Takai Y. Kojima
2010/7/19-23	Poster MH2010 -International Symposium- (Moscow University, Russia)	Structural Investigation of $\text{LiAl}(\text{NH}_2)_4$ on Thermal Decomposition	T. Ono K. Shimoda M. Tsubota T. Ichikawa Y. Kojima

2010/8/1-5	Oral The 7 th Pacific Rim International Conference on Advanced Material and Processing (Australia)	Research and Development of Nano-Composite Materials for Hydrogen Storage	Y. Kojima
2010/8/1-5	Oral The 7 th Pacific Rim International Conference on Advanced Material and Processing (Australia)	Hydrogen Exchange Effect in MgH ₂ -LiBH ₄ System	L. Zeng H. Miyaoka T. Ichikawa Y. Kojima
2010/8/10-11	招待講演 日本金属学会 2010 年中四国支部大会 (山口大学、山口)	水素貯蔵物質の高容量化・高性能化	小島由継
2010/8/17-19	Oral Hydrogen Workshop (Grand Hyatt San Francisco, USA)	Basic Research of Alkali Metal Amideborane-Based Hydrogen Storage Materials	Y. Kojima
2010/9/3-4	ポスター発表 第 5 回 水素若手研究会 (九州大学、福岡)	アンモニアを水素キャリアとした高圧水素製造プロセス	宮岡裕樹、市川貴之、小島由継
2010/9/3-4	ポスター発表 第 5 回 水素若手研究会 (九州大学、福岡)	NaNH ₂ BH ₃ の熱分解過程の NMR 解析	下田景士、Y. Zhang、市川貴之、小島由継
2010/9/3-4	ポスター発表 第 5 回 水素若手研究会 (九州大学、福岡)	アルカリ金属水素化物の気相-気相合成法および水素放出特性	山本ひかる、宮岡裕樹、市川貴之、小島由継
2010/9/10	招待講演 水素エネルギー協会 第 132 回定例研究会 (東京大学医学部 鉄門記念講堂、東京)	MH-NH ₃ システムによる高圧水素製造	市川貴之、宮岡裕樹、小島由継
2010/9/25-27	口頭発表 日本金属学会 2010 年秋期大会 (北海道大学、	リチウム-炭素化合物の水素吸蔵特性	宮岡裕樹、山中俊幸、市川貴之、小島由継

	北海道)		
2010/9/25-27	口頭発表 日本金属学会 2010 年 秋期大会 (北海道大学、 北海道)	Phonon Propagation in LiNH ₂	B. Paik、宮岡裕樹、 坪田雅己、市川貴 之、小島由継
2010/9/25-27	口頭発表 日本金属学会 2010 年 秋期大会 (北海道大学、 北海道)	アンモニアボラン系材料の 熱分解生成物のキャラクタ リゼーション	下田景士、Y. Zhang、 市川貴之、小島由継
2010/9/25-27	口頭発表 日本金属学会 2010 年 秋期大会 (北海道大学、 北海道)	Dehydrogenation of NH ₃ BH ₃ 、 NaNH ₂ BH ₃ and LiNH ₂ BH ₃ in Ionic Liquid	Y. Zhang、市川貴之、 小島由継
2010/9/25-27	口頭発表 日本金属学会 2010 年 秋期大会 (北海道大学、 北海道)	Catalytic Effect of the Possible Intermediates in the Ti-Compound Catalyzed Li-N-H System	Y. Teng、日野聡、市 川貴之、小島由継
2010/9/25-27	口頭発表 日本金属学会 2010 年 秋期大会 (北海道大学、 北海道)	Hydrogen Production from the Electrolysis of Liquid Ammonia	B. Dong、花田信子、 花輪亮、市川貴之、 日野聡、鈴木啓史、 高井健一、小島由継
2010/9/25-27	口頭発表 日本金属学会 2010 年 秋期大会 (北海道大学、 北海道)	LiH、 LiNH ₂ の薄膜合成及 び赤外分光評価	中村耕生、藤井博 信、市川貴之、小島 由継
2010/9/25-27	口頭発表 日本金属学会 2010 年 秋期大会 (北海道大学、 北海道)	軽元素系水素貯蔵物質の X 線光電子分光測定	山本ひかる、 中村耕生、宮岡裕 樹、市川貴之、 小島由継
2010/9/25-27	口頭発表 日本金属学会 2010 年 秋期大会 (北海道大学、 北海道)	第一原理分子動力学法によ る LiNH ₂ BH ₃ からの水素 放出	山根阿樹、下條冬 樹、星野公三、 市川貴之、小島由継
2010/11/7-12	Invited Lecture 2010 AIChE Annual Meeting (Salt Palace Convention Center、 Salt	Research and Development of Hydrogen Storage Materials for Lightweight Tanks	Y. Kojima T. Ichikawa

	Lake City、 UT、 USA)		
2010/11/14-19	Invited Lecture 11th Conference on Solid State Chemistry and Inorganic Synthesis (Shanghai、 China)	Research and Development of Lightweight Inorganic Materials for Hydrogen Storage	T. Ichikawa Y. Kojima
2010/11/14-19	Invited Lecture 11th Conference on Solid State Chemistry and Inorganic Synthesis (Shanghai、 China)	Hydrogen Exchange Effect on Hydrogen Desorption Process of MgH ₂ and LiBH ₄ System	H. Miyaoka L. Zeng T. Ichikawa Y. Kojima
2010/11/14-19	Oral 11th Conference on Solid State Chemistry and Inorganic Synthesis (Shanghai、 China)	Low-Temperature and High-Purity Hydrogen Generation and Mechanistic Studies of Alkaline-Metal Amidoboranes	Y. Zhang K. Shimoda T. Ichikawa Y. Kojima
2010/12/1-3	口頭発表 第37回 炭素材料学会 (姫路市民会館、 兵庫)	鉄-カーボン系水素貯蔵材料の水素吸蔵・放出特性	佐藤他加志、 宮岡裕樹、市川貴之、小島由継
2010/12/6-7	口頭発表 第30回 水素エネルギー協会大会 (タワーホール船堀、 東京)	電気分解による液体アンモニアからの水素発生	市川貴之、B. Dong、 日野聡、花田信子、 鈴木啓史、高井健一、 小島由継
2010/12/9-11	口頭発表 材料にける水素有効利用研究会 (指宿いわさきホテル、 鹿児島)	水素貯蔵材料としてのアンモニアボランの研究	宮岡裕樹、Y. Zhang、 下田景士、市川貴之、 小島由継
2011/1/17-21	Oral International Conference on Renewable Energy (Indralok Auditorium, Jaipur, India)	Liquid Ammonia as a Hydrogen Carrier	H. Miyaoka T. Ichikawa Y. Kojima
2011/1/17-21	Oral International Conference on Renewable Energy (Indralok Auditorium, Jaipur, India)	Thermal Diffusivity of LiNH ₂ : Contribution of temperature, mechanical pressure and microstructure	B. Paik T. Ichikawa Y. Kojima

2011/3/8-10	Oral The 1 st International Symposium on Advanced Nanostructured Materials for Clean Energy (ANMCE) 2011, Osaka	Solid state NMR Study on Dehydrogenation of NaNH ₂ BH ₃	K. Shimoda Y. Zhang H. Miyaoka T. Ichikawa Y. Kojima
2011/3/8-10	Poster The 1 st International Symposium on Advanced Nanostructured Materials for Clean Energy (ANMCE) 2011, Osaka	Synthesis and Investigation of Decomposition Mechanism of Lithium Hydrazide	L. Zeng K. Shimoda K. Nakamura H. Miyaoka T. Ichikawa Y. Kojima

(非金属系 G : 北海道大学)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2010/5/23-26	口頭発表 日本顕微鏡学会第66回学術講演会, 名古屋国際会議場	超高压電顕用環境セルホルダーの開発と水素貯蔵材料への適用	磯部繁人, 若杉剛伸, 王永明, 橋本直幸, 大貫惣明, 大田繁
2010/7/19-23	ポスター発表 MH2010, Moscow	Study on Hydrogen Storage Materials by TEM	S. Isobe Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki
2010/7/19-23	ポスター発表 MH2010, Moscow	In-situ TEM Observation of Hydrogen Storage Reaction with Environmental Cell	T. Wakasugi H. Hirasawa E. Morita H. Yao A. Ono S. Isobe Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki
2010/7/19-23	ポスター発表 MH2010, Moscow	Compositional Effect on the Kinetics of LiH - Mg(NH ₂) ₂ Reaction	Y. Wang S. Isobe N. Hashimoto S. Ohnuki
2010/7/29	ポスター発表	アルカリ(土類)金属-	山田須弥人, 磯部繁

	日本金属学会・日本鉄鋼協会両支部サマーセッション(北海道大学)	炭素複合系水素吸蔵材料の TEM を用いた微視的観察	人, 王永明, 橋本直幸, 大貫惣明, 山中俊幸, 市川貴之, 小島, 由継
2010/7/29	ポスター発表 日本金属学会・日本鉄鋼協会両支部サマーセッション(北海道大学)	超高压電顕用環境セルホルダーを用いたマグネシウムの水素化反応その場観察	若杉剛伸, 磯部繁人, 王永明, 森田襟, 梅田綾香, 橋本直幸, 大貫惣明
2010/7/29	ポスター発表 日本金属学会・日本鉄鋼協会両支部サマーセッション(北海道大学)	Study on Sodium Alanate with and without Ti-catalyst by Means of Transmission Electron Microscope	H. Yao, S. Isobe, Y. Wang, N. Hashimoto, S. Ohnuki
2010/7/29	ポスター発表 日本金属学会・日本鉄鋼協会両支部サマーセッション(北海道大学)	「水素化マグネシウムに添加した触媒の分散と反応速度の相関	森田襟, 馬涛, 磯部繁人, 王永明, 橋本直幸, 大貫惣明, 木村通, 市川貴之, 小島由継
2010/7/29	ポスター発表 日本金属学会・日本鉄鋼協会両支部サマーセッション(北海道大学)	Sc-M-B-H 系水素貯蔵材料(M=Mg, Ca)の反応過程の微視的考察	稲月亮太, 磯部繁人, 王永明, 橋本直幸, 大貫惣明, 中川鉄水, 市川貴之, 小島由継
2010/7/29	ポスター発表 日本金属学会・日本鉄鋼協会両支部サマーセッション(北海道大学)	透過電子顕微鏡による Li ₂ NH の水素化反応機構の検討	堂腰美妃, 磯部繁人, 王永明, 橋本直幸, 大貫惣明, 日野聡, 市川貴之, 小島由継
2010/7/29	ポスター発表(受賞) 日本金属学会・日本鉄鋼協会両支部サマーセッション(北海道大学)	水素貯蔵材料 AB-MH(M=Li,Na) 複合物質の微細構造	李忠賢, 磯部繁人, 王永明, 橋本直幸, 大貫惣明, Yu Zhang, 市川貴之, 小島由継
2010/8/1-5	Oral The 7 th Pacific Rim International Conference on	Microscopic Reaction Mechanism of Hydrogen Storage	S. Isobe Y. Wang A. Ono

	Advanced Material and Processing (Australia)	Materials by TEM	H. Hirasawa H. Yao N. Hashimoto S. Ohnuki T. Ichikawa Y. Kojima
2010/8/1-5	Oral The 7 th Pacific Rim International Conference on Advanced Material and Processing (Australia)	Microscopic Observation on Hydrogen Storage Materials of Sc-M-B-H System (M = Mg, Ca) by TEM	R. Inazuki S. Isobe Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki K. Shimoda T. Nakagawa T. Ichikawa Y. Kojima
2010/8/1-5	Oral The 7 th Pacific Rim International Conference on Advanced Material and Processing (Australia)	Microstructural analysis of ball-milled composites of nano-structural graphite and alkali (-earth) metal	S. Yamada S. Isobe Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki T. Yamanaka T. Ichikawa Y. Kojima
2010/8/1-5	Poster The 7 th Pacific Rim International Conference on Advanced Material and Processing (Australia)	Determination of reaction mechanism in Li-N-H hydrogen storage system by TEM	M. Dohkoshi S. Isobe Y. Wang H. Yamamoto H. Miyaoka N. Hashimoto S. Ohnuki T. Ichikawa Y. Kojima
2010/8/1-5	Poster The 7 th Pacific Rim International Conference on Advanced Material and Processing (Australia)	In-situ TEM observation for dehydrogenation mechanism in MgH ₂ with catalyst	E. Morita A. Ono S. Isobe Y. Wang N. Hashimoto

			S. Ohnuki
2010/8/1-5	Poster The 7 th Pacific Rim International Conference on Advanced Material and Processing (Australia)	Study on decomposition process of Sodium Alanate by means of Transmission Electron Microscope	H. Yao S. Isobe Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki
2010/9/3-4	ポスター発表 第 5 回 水素若手研究会 (九州大学、福岡)	超高压電顕用環境セルホルダを用いたマグネシウムの水素化反応その場観察	若杉剛伸, 磯部繁人, 王永明, 橋本直幸, 大貫惣明
2010/9/3-4	ポスター発表 第 5 回 水素若手研究会 (九州大学、福岡)	水素貯蔵材料 AB-MH(M=Li,Na) 複合物質の微細構造	李忠賢, 磯部繁人, 王永明, 橋本直幸, 大貫惣明, Yu Zhang, 市川貴之, 小島由継
2010/9/3-4	ポスター発表 第 5 回 水素若手研究会 (九州大学、福岡)	Mg-Nb ₂ O ₅ 系水素貯蔵材料の水素化反応過程における微細構造の TEM 観察	梅田綾香, 磯部繁人, 若杉剛伸, 森田襟, 王永明, 橋本直幸, 大貫惣明
2010/9/3-4	ポスター発表 第 5 回 水素若手研究会 (九州大学、福岡)	メカノケミカル法による AlH ₃ -AB 複合物質の創製	中川祐貴, 李忠賢, 磯部繁人, 王永明, 橋本直幸, 大貫惣明, Yu Zhang, 市川貴之, 小島由継
2010/9/25-27	口頭発表 日本金属学会 2010 年秋期大会 (北海道大学、北海道)	水素化マグネシウムに添加した触媒の分散過程と反応速度向上の相関	森田襟, 馬涛, 磯部繁人, 王永明, 橋本直幸, 大貫惣明, 木村通, 市川貴之, 小島由継
2010/9/25-27	口頭発表 日本金属学会 2010 年秋期大会 (北海道大学、北海道)	透過電子顕微鏡による Li ₂ NH の水素化反応機構の検討	堂腰美妃, 磯部繁人, 王永明, 橋本直幸, 大貫惣明, 日野聡, 市川貴之, 小島由継
2010/9/25-27	口頭発表 日本金属学会 2010 年秋期大会 (北海道大学、北海道)	電子線照射による軽金属水素化物の分解について考察	王永明, 磯部繁人, 橋本直幸, 大貫惣明

2010/9/25-27	口頭発表 日本金属学会 2010 年秋期大会 (北海道大学、北海道)	Study on Sodium Alanate with and without Ti-catalyst by Means of Transmission Electron Microscope	H. Yao, S. Isobe, Y. Wang, N. Hashimoto, S. Ohnuki
2010/9/25-27	口頭発表 日本金属学会 2010 年秋期大会 (北海道大学、北海道)	触媒添加した水素化マグネシウムの反応速度と触媒表面の化学結合状態の関係	森田襟, 馬濤, 磯部繁人, 王永明, 橋本直幸, 大貫惣明, 木村通, 市川貴之, 小島由継
2010/11/11-13	招待講演 日本顕微鏡学会第54回シンポジウム, 金沢文化市民ホール	電子顕微鏡その場観察—水素貯蔵材料への応用	磯部繁人
2010/12/11	口頭発表 日本顕微鏡学会北海道支部講演会, 酪農学園大学	超高圧電顕用環境セルを用いた水素貯蔵材料の水素化反応その場観察	若杉剛伸, 磯部繁人, 王永明, 橋本直幸, 大貫惣明
2010/12/15-20	招待講演 The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies Hawaii	Study on Reaction Mechanism of Hydrogen Storage Materials by TEM	S. Isobe Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki
2011/1/27-28	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, 室蘭工業大学	透過電子顕微鏡による触媒を添加したLi ₂ NHの水素化反応機構の検討	堂腰美妃, 磯部繁人, 張騰飛, 王永明, 橋本直幸, 大貫惣明, 日野聡, 市川貴之, 小島由継
2011/1/27-1/28	口頭発表(受賞) 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, 室蘭工業大学	水素化マグネシウムの反応速度と触媒表面の化学結合状態の関係	森田襟, 馬濤, 磯部繁人, 王永明, 橋本直幸, 大貫惣明, 木村通, 市川貴之, 小島由継
2011/1/27-28	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, 室蘭工業大学	酸化ニオブを添加したマグネシウムの水素化反応の透過型電子顕微鏡その場観察	梅田絢香, 若杉剛伸, 磯部繁人, 王永明, 橋本直幸, 大貫惣明
2011/1/27-28	口頭発表	AlH ₃ 脱水素化反応と	中川祐貴, 磯部繁

	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, 室蘭工業大学	Al ₂ O ₃ 膜の構造	人, 王永明, 橋本直幸, 大貫惣明, 日野聡, 市川貴之, 小島由継
2011/3/4-5	口頭発表 Int. Symp. on Advanced Energy Systems and Materials, Busan, KOREA	TEM study on Hydrogen Storage Materials	S. Isobe Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki
2011/3/4-5	ポスター発表 Int. Symp. on Advanced Energy Systems and Materials, Busan, KOREA	Study on Decomposition Process of Sodium Alanate by Means of Transmission Electron Microscope	H. Yao S. Isobe Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki
2011/3/4-5	ポスター発表 Int. Symp. on Advanced Energy Systems and Materials, Busan, KOREA	In-situ TEM observation of hydrogenation reaction in Mg catalyzed with Nb ₂ O ₅	A. Umeda T. Wakasugi S. Isobe Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki

(非金属系 G : 上智大学)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2010/7/1	Oral Renewable energy 2010 (Yokohama, Japan)	Electrochemical hydrogen charge for light hydrogen storage materials	N. Hanada R. Hanawa A. Kamura H. Suzuki, K. Takai T. Ichikawa Y. Kojima
2010/7/6	Oral 1st international conference on materials for energy (Karlsruhe, Germany)	Electrochemical synthesis of high capacity metal hydrides in the system of Li-ion extraction and insertion	N. Hanada, H. Suzuki, A. Kamura, K. Takai, T. Ichikawa, Y. Kojima
2010/7/19-23	Poster MH2010 -International	Electrochemical charge and discharge properties for the	N. Hanada H. Suzuki

	Symposium- (Moscow University, Russia)	formation of magnesium and aluminum hydrides	A. Kamura K. Takai T. Ichikawa Y. Kojima
2010/7/19-23	Poster MH2010 -International Symposium- (Moscow University, Russia)	Effect of deformation on hydrogen absorption and desorption properties of titanium	H. Suzuki H. Taniguchi N. Hanada K. Takai Y. Hagihara
2010/9/25-27	口頭発表 日本金属学会 2010 年秋期大会 (北海道大学、北海道)	アンモニアボランの電気化学的手法による水素放出	花田信子, 鈴木啓史, 高井健一, 市川貴之, 小島由継
2010/9/25-27	口頭発表 日本金属学会 2010 年秋期大会 (北海道大学、北海道)	電解チャージを施した純 Al の水素吸蔵放出特性と水素存在状態	花輪 亮, 花田信子, 鈴木啓史, 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
2011/5/23-26	ポスター発表 1st Asian Symposium on Hydrogen Storage Materials (AHSM2011)	Mössbauer study on the hydrides of C15 RFe ₂ (R=Sm, Gd) compounds	R. Masuda, T. Mitsui, K. Itoh, K. Sakaki, H. Enoki, Y. Nakamura, Y. Kobayashi, S. Kitao, M. Seto
2011/5/23-26	口頭発表 1st Asian symposium on hydrogen storage materials (AHSM2011)	Neutron Diffraction Study of Pressure-Induced Phase Separation of LaD ₂	K. Aoki, A. Machida, M. Honda, T. Hattori, A. Sano, T. Watanuki, Y. Katayama, K. Komatsu,

			H. Arima, T. Otomo, M. Tsubota, T. Ichikawa, Y. Kojima, D.Y. Kim
2011/5/23-26	口頭発表 1st Asian symposium on hydrogen storage materials (AHSM2011)	High speed x-ray diffraction measurements of hydrogen storage alloy on hydrogen absorption and desorption processes	K. Higuchi, A. Machida, Y. Katayama, K. Sakaki, Y. Nakamura
2011/5/25	口頭発表 1st Asian symposium on Hydrogen Storage Materials (AHSM-2011)	Hydrogenation of aluminum at high pressures and temperatures	齋藤寛之, 町田 晃彦, 片山芳則, 青木勝敏
2011/6/14	ポスター発表 International Space Conference on Protection of Materials and Structures from Space Environment	Hydrogen removal from hydrogenated diamond-like carbon films by photon and energetic atomic oxygen beam exposures	K. Yokota, M. Tagawa, K. Matsumoto, Y. Furuyama, A. Kitamura, K. Kanda, M. Tode, A. Yoshigoe, Y. Teraoka
2011/7/18-19	ポスター発表 Gordon Research Conference 2011 “Hydrogen-Metal Systems”	Real-time-resolved Observation of Hydrogen Absorption Reaction for Pd Nanoparticles	D. Matsumura, Y. Okajima, Y. Nishihata, J. Mizuki
2011/7/18-19	ポスター発表 Gordon Research Conference 2011 “Hydrogen-Metal Systems”	Electronic states of amide hydrides	N. Kamakura, Y. Takeda, T. Okane, S.-i. Fujimori, Y. Saitoh, H. Yamagami, H. Miyaoka, M. Tsubota,

			T. Ichikawa, Y. Kojima, T. Muro, T. Kinoshita
2011/7/20-21	ポスター発表 Gordon Research Conference on Hydrogen-Metal Systems	Formation of NaCl-type mono-deuteride in La-D system at high pressure	A. Machida, M. Honda, T. Hattori, A. Sano-Furukawa , T. Watanuki, Y. Katayama, K. Aoki, K. Komatsu, H. Arima, H. Ohshita, T. Otomo, M. Tsubota, K. Doi, T. Ichikawa, Y. Kojima, D.Y. Kim
2011/8/29-30	ポスター発表 6th Symposium on Hydrogen for Young Scientists	Phase relationship and equation of state of TiH ₂ at high pressures and high temperatures	遠藤成輝, 齋藤 寛之, 町田晃彦, 片山芳則, 青木 勝敏
2011/8/22	口頭発表 第9回水素量子アトムク ス研究会	希土類金属水素化物の高圧 下における格子間水素の移 動と1水素化物の形成	町田晃彦, 本田 充紀, 服部高典, 佐野亜沙美, 綿 貫徹, 片山芳則, 青木勝敏, 小松 一生, 有馬寛, 大下英敏, 大友 季哉, D. Y. Kim
2011/8/23-24	ポスター発表 XXII Congress and General Assembly of the International Union of	Neutron diffraction study on the pressure-induced cubic-tetragonal structural distortion in LaD ₂ using total	M. Honda, T. Hattori, A. Machida, A.

	Crystallography (IUCr2011)	scattering spectrometer NOVA	Sano-Furukawa, Y. Katayama, K.Aoki, H. Arima, K. Komatsu, H. Ohshita, T. Otomo
2011/8/24	口頭発表 XXII Congress and General Assembly of the IUCr (IUCr 2011) (Madrid, Spain)	Structural, magnetic and electrical properties of iron-hydride	N. Hirao, Y. Ohishi, T. Matsuoka, T. Mitsui, K. Takemura, K. Shimizu, A. Machida, K. Aoki
2011/8/27-28	ポスター発表 XXII Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography	Structure of liquid transition metal hydrogen alloys under high pressure	Y. Katayama, H. Saitoh, K. Aoki
2011/8/30	口頭発表 The 49th Meeting of the European High Pressure Research Group (EHPRG-49)	Phase Separation with Inter-Site Deuteron Transfer in LaD ₂	K. Aoki, A. Machida, M. Honda, T. Hattori, A. Sano, T. Watanuki, Y. Katayama, K. Komatsu, H. Arima, T. Otomo, M. Tsubota, T. Ichikawa, Y. Kojima, D.Y. Kim
2011/8/30	口頭発表 第72回応用物理学会学術 講演会	原子状酸素照射時における Si 添加高水素 DLC 膜からの 揮発性反応生成物脱離	田川雅人, 横田 久美子, 岸田和 博, 古山雄一,

			戸出真由美, 吉越章隆, 寺岡有殿, T. K. Minton
2011/9/8	口頭発表 日本セラミックス協会 第24回秋季シンポジウム	放射光 X 線回折によるアルミニウム水素化反応のその場観察	齋藤寛之, 町田晃彦, 片山芳則, 青木勝敏
2011/9/23	ポスター発表 日本物理学会 2011 年秋季大会	触媒及び水素吸蔵反応中の Pd 微粒子動的構造	松村大樹, 岡島由佳, 西畑保雄, 水木純一郎
2011/9/23	口頭発表 日本物理学会 2011 年秋季大会	液体遷移金属水素合金の構造 II	片山芳則, 齋藤寛之, 青木勝敏
2011/9/23	口頭発表 日本物理学会 2011 年秋季大会	超高圧力下 RFe ₂ 合金の高密度水素吸収と逐次磁気転移	三井隆也, 増田亮, 平尾直久, 松岡岳洋
2011/9/26	口頭発表 31st International Conference on the Applications of the Mossbauer Effect (ICAME2011)	Energy Domain Synchrotron Radiation ⁵⁷ Fe-Mossbauer Spectroscopy using Nuclear Bragg Monochromator and its Applications	T.Mitsui, R. Masuda, N. Hirao, K. Mibu, M. Seto
2011/9/26	口頭発表 31st International Conference on the Applications of the Mossbauer Effect (ICAME2011)	An in-situ Mossbauer study using synchrotron radiation	R. Masuda, T. Mitsui, K. Itoh, K. Sakaki, H. Enoki, Y. Nakamura, M. Seto
2011/9/25	ポスター発表 AIRAPT-23; International Conf. of High Pressure Sci. and Technol. (Mumbai, India)	High Pressure Raman and Visible Absorption Study on Rare-Earth Trihydrides with FCC Structure	T. Kume, T. Nakamoto, N. Shimura, S. Sasaki, H. Shimizu, A. Machida, T. Watanuki, K. Aoki, K. Takemura

2011/9/27	口頭発表（招待講演） International Conferences on High Pressure Science and Technology (AIRAPT-23)	X-ray and Neutron Diffraction Studies of Pressure-induced Phase Separation of LaD ₂	A. Machida, M. Honda, T. Hattori, A. Sano-Furukawa , T. Watanuki, Y. Katayama, K. Aoki, K. Komatsu, H. Arima, H. Ohshita, T. Otomo, M. Tsubota, T. Ichikawa, Y. Kojima, D.Y. Kim
2011/10/4	ポスター発表 11th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures	Simultaneous measurements of D ₂ thermal desorption and surface photoemission on oxidized V(001) surface	Y. Teraoka, M. Tode, J. Harries, A. Yoshigoe
2011/10/24	口頭発表 Low Carbon Earth Summit 2011 (LCES-2011)	Hydrogenation of Aluminum at High Pressures and Temperatures	齋藤 寛之, 町 田 晃彦, 片山 芳則, 青木 勝 敏
2011/11/1	ポスター発表 SPring-8 コンファレンス 2011	放射光メスbauer分光に よる水素関連材料研究	三井 隆也, 瀬 戸 誠
2011/11/7	ポスター発表 日本金属学会 2011 年秋期 (第 149 回) 大会	重水素化 V(001)酸化表面の 熱変性と D ₂ 昇温脱離温度と の相関	戸出真由美, J. R. Harries, 寺岡 有殿, 吉越章隆
2011/11/8	口頭発表 日本金属学会 2011 年秋期 (第 149 回)大会	アルミニウム金属中への水 素の固溶	齋藤寛之, 町田 晃彦, 片山芳則, 青木勝敏
2011/11/9	口頭発表 日本金属学会 2011 年秋期	放射光その場 X 線回折測定 による TiH ₂ の高温高压状態	遠藤成輝, 齋藤 寛之, 町田晃彦,

	(第 149 回)大会	図の決定	片山芳則, 青木勝敏
2011/11/9	口頭発表 日本金属学会 2011 年秋期 (第 149 回)大会	LaNi _{4.5} Al _{0.5} 合金の水素吸蔵反応過程における時分割 X 線回折測定	樋口健介, 町田晃彦, 片山芳則, 榊浩司 Hyunjeong Kim, 中村優美子
2011/11/9	口頭発表 日本金属学会 2011 年秋期 (第 149 回)大会	アルカリ金属アミド・アルカリ土類金属アミドの電子状態	鎌倉望, 竹田幸治, 山上浩志, 宮岡裕樹, 坪田雅己, 市川貴之, 小島由継, 室隆桂之, 木下豊彦
2011/11/9	口頭発表 日本金属学会 2011 年秋期 (第 149 回)大会	Searching for the Structural Origin of the Excellent/poor Cyclic Properties of V-based bcc Alloys	Kim Hyunjeong, 榊浩司, 中村優美子, 中村仁, 秋葉悦男, 町田晃彦, 綿貫徹, 青木正和, 則竹達夫, T. Proffen
2011/11/9	口頭発表 第 52 回高圧討論会	高圧下におけるランタン 2 水素化物の構造相転移	本田充紀, 町田晃彦, 服部高典, 佐野亜沙美, 綿貫徹, 片山芳則, 青木勝敏, 有馬寛, 小松一生, 大下英敏, 大友季哉, 藤久裕司
2011/11/9	口頭発表 第 52 回高圧討論会	高圧力下における LaD ₂ の相分離と 1 重水素化物の形成	町田晃彦, 本田充紀, 服部高典, 佐野亜沙美, 綿貫徹, 片山芳則, 青木勝敏, 有馬寛, 小松一生, 大下英敏, 大友

			季哉, D. Y. Kim
2011/11/9	口頭発表 第 52 回高圧討論会, 沖縄	立方晶系希土類三水素化物 の高圧ラマン散乱及び紫外 可視吸収分光	中本琢磨, 志村 直哉, 熊崎洋平, 久米徹二, 佐々 木重雄, 清水宏 晏, 青木勝敏, 綿貫徹, 町田晃 彦
2011/11/9	口頭発表 第 52 回高圧討論会 (沖 縄)	高水素圧力の印加が誘起す る EuH_x の結晶構造と価数 の変化	松岡岳洋, 清水 克哉, 藤久裕司, 平尾直久, 大石 泰生, 依田芳卓, 三井隆也, 増田 亮, 町田晃彦, 青木勝敏, 瀬戸 誠
2011/11/9	口頭発表 第 52 回高圧討論会 (沖 縄)	鉄水素化物の高圧力下での 結晶構造と物性	大石泰生, 平尾 直久, 松岡岳洋, 清水克哉, 三井 隆也, 町田晃彦, 青木勝敏
2011/11/10	口頭発表 第 52 回高圧討論会	角度分散 X 線回折によるア ルミニウム水素化反応のそ の場観察	齋藤寛之, 町田 晃彦, 片山芳則, 青木勝敏
2011/11/10	口頭発表 第 52 回高圧討論会	TiH_2 の高温高圧相関係	遠藤成輝, 齋藤 寛之, 町田晃彦, 片山芳則, 青木 勝敏
2011/11/11	口頭発表 第 52 回高圧討論会	液体遷移金属水素合金の構 造 II	片山芳則, 齋藤 寛之, 青木勝敏
2011/11/16	ポスター発表 第 52 回真空に関する連合 講演会	V(001)表面酸化膜の熱変性過 程の光電子分光観察と重水 素脱離の同時測定	戸出真由美, J. R. Harries, 寺岡 有殿, 吉越章隆
2011/11/23	口頭発表 1st Asia-Oceania Conference on Neutron Scattering (1st AOCNS)	Pressure-Induced Phase Separation with Intersite Hydrogen Transfer in Rare-earth Metal Hydrides	K. Aoki, A. Machida, M. Honda, T. Hattori,

			A. Sano-Furukawa , T. Watanuki, Y. Katayama, K. Komatsu, H. Arima, H. Ohshita, T. Otomo, M. Tsubota, K. Doi, T. Ichikawa, Y. Kojima, D.Y. Kim
2011/12/14	ポスター発表 6th International Symposium on Surface Science -Towards Nano-, Bio-, and Green Innovation -	A chemical-state specific study of the composition of the natural oxide layer of $V_{25}Cr_{40}Ti_{35}$	J. R. Harries, Y. Teraoka, M. Tode, A. Yoshigoe
2011/12/15	ポスター発表 第31回表面科学学術講演 会	A chemical-state specific study of the composition of the natural oxide layer of $V_{25}Cr_{40}Ti_{35}$	J. Harries, 寺岡 有殿, 戸出真由 美, 吉越章隆
2012/1/5	口頭発表 地球惑星科学研究会・高 圧物質科学研究会 合同 研究会合	アルミニウム水素化反応の 放射光その場観察	齋藤寛之, 町田 晃彦, 片山芳則, 青木勝敏
2012/1/8	口頭発表 第25回日本放射光学会年 会・放射光科学合同シン ポジウム	アルミニウム水素化物の軟 X 線発光・吸収分光-金属と水素 の結合様式の実験的解明	竹田幸治
2012/1/8	口頭発表 第25回日本放射光学会年 会・放射光科学合同シン ポジウム	ナノ金属粒子の時分割 XAFS-水素化反応の律速要因 の解析	松村大樹
2012/1/8	口頭発表 第25回日本放射光学会年	金属単結晶の表面 X 線回折- 水素吸収のチャンネル形成	高橋正光

	会・放射光科学合同シンポジウム	の推測	
2012/1/8	ポスター発表 第25回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム	重水素が固溶した V(001)面からの D ₂ 分子の熱脱離に及ぼす表面酸化膜の影響	寺岡 有殿, 戸出 真由美, James Harries, 吉越 章隆
2012/1/9	ポスター発表 第25回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム	多素子 SSD を用いたエネルギー分散型 X 線回折測定 II	片山芳則, 齋藤 寛之, 金子洋
2012/1/20	口頭発表 第3回 MLF シンポジウム	LaD ₂ の圧力誘起相分離に伴う新規水素化物の形成	町田 晃彦, 本田 充紀, 服部 高典, 佐野 亜沙美, 綿貫 徹, 片山 芳則, 青木 勝敏, 小松 一生, 有馬 寛, 大下 英敏, 大友 季哉, D.Y. Kim
2012/2/2	口頭発表 (招待講演) I2CNER International Workshop 2012	High Speed Structural Measurements on Hydrogen Absorption Processes of Hydrogen Storage alloys	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
2010/5/16	ポスター発表 4 th International Conference on New Diamond and Nano Carbons (NDNC2010)	Radiation effect of the soft X-ray on the highly-hydrogenated diamond-like carbon film	K. Kanda, K. Yokota, M. Tagawa, M. Tode, Y. Teraoka, S. Matsui

(材料物性 G: 神戸大学)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2010/5/16	ポスター発表	Radiation effect of the soft X-ray on	K. Kanda,

	4 th International Conference on New Diamond and Nano Carbons (NDNC2010)	the highly-hydrogenated diamond-like carbon film	K. Yokota, M. Tagawa, M. Tode, Y. Teraoka, S. Matsui
--	---	--	--

(材料物性 G:大阪大学)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2010/6/27	ポスター発表 Gordon Research Conference (GRC)	Pressure induced insulator-metal transition of yttrium tri-hydride (YH ₃)	Nguyen T. L. HUYEN, Zhenhua CHI, Takahiro MATSUOKA, Yuki NAKAGAWA, Tomoko KAGAYAMA and Katsuya SHIMIZU
2010/6/30	ポスター発表 Gordon Research Conference, High Pressure Research AT. (New Hampshire, USA)	High-Pressure and Low-temperature Studies of FeHx by Electrical resistance and XRD measurement	T. Matsuoka , N. Hirao , Y. Ohishi , K. Shimizu , A. Machida , K. Aoki
2010/7/26	ポスター発表 International conference of European High Pressure Research Group (EHPRG) 2011 (Sweden, Uppsala)	Structural and electrical transport properties of FeHx under high pressures and low temperatures	T. Matsuoka , N. Hirao , Y. Ohishi , K. Shimizu , A. Machida , K. Aoki
2010/8/23	ポスター発表 International Center for Material Research (ICMR) kick-off Meeting on High Pressure Research (Santa Barbara, USA)	Structural and electrical transport properties of FeHx under HP and LT conditions	T. Matsuoka , N. Hirao , Y. Ohishi , K. Shimizu , A. Machida , K. Aoki

2010/10/21	口頭発表 第 51 回高圧討論会 (仙台)	高水素圧力下で出現する EuHx の新高圧相	松岡岳洋, 平尾 直久, 大石泰生, 藤久裕司, 清水 克哉, 町田晃彦, 青木勝敏
2010/10/28	ポスター発表 平成 36 年度 G-COE 若手秋の学校「量子物 性の解明と新機能」	On the Way to Metallic and Superconductive Phase of YH ₃	Zhenhua Chi, Huyen Nguyen, Takahiro Matsuoka, Tomoko Kagayama, Katsuya Shimizu
2010/11/4	ポスター発表 第 51 回真空に関する 連合講演会	放射光 X 線光電子分光 を用いた TiAl 表面酸化反応の研究	橋之口道宏, 角 本雄一, 戸出真 由美, 岡田美智 雄, J. R. Harries, 寺岡有殿, 笠井 俊夫
2010/11/8	ポスター発表 5th Asian Conference on High Pressure Research	High pressure effect on property of perovskite hydrides, CaNiH ₃ and CaCoH ₃	Huyen Nguyen, Zhenhua Chi, Katsuya Shimizu, Motoaki Matsuo, Kazutaka Ikeda, Shin-ichi Orimo
2010/11/8	ポスター発表 5th Asian Conference on High Pressure Research	On the Way to Metallic and Superconductive Phase of YH ₃	Zhenhua Chi, Huyen Nguyen, Takahiro Matsuoka, Tomoko Kagayama, Katsuya Shimizu
2011/3/29	ポスター発表 Study of Matters under Extreme Conditions (SMEC)2011 (Miami, USA)	Structural and Magnetic Properties of dense Iron Hydride	T. Matsuoka, Y. Ohishi, N. Hirao, T. Mitsui, K. Takemura, K. Shimizu,

			A. Machida, K. Aoki
2011/3/30	口頭発表 Study of Matters under Extreme Conditions (SMEC)2011 (Miami, USA)	Hydrogen induced structural transitions of EuHx	T. Matsuoka, N. Hirao, Y. Ohishi, H. Fujihisa, T. Mitsui, R. Masuda, T. Yoda, M. Seto, K. Shimizu, A. Machida, K. Aoki

(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
2010/4/7	ポスター発表 Materials Research Society 2010 Spring Meeting	Development of an energy domain ⁵⁷ Fe Mossbauer spectrometer using synchrotron radiation and its application to ultrahigh-pressure study on metal hydrides	三井隆也, 平尾 直久
2010/4/7	口頭発表 Materials Research Society 2010 Spring Meeting	Magnetic state in iron hydride under pressure studied by X-ray magnetic circular dichroism at the Fe K-edge	N. Ishimatsu, Y. Matsushima, H. Maruyama, T. Tsumuraya, T. Oguchi, N. Kawamura, M. Mizumaki, T. Matsuoka, K. Takemura
2010/6/30	ポスター発表 Gordon Research Conference, High Pressure Research AT. (New Hampshire, USA)	High-Pressure and Low-temperature Studies of FeHx by Electrical resistance and XRD measurement	T. Matsuoka , N. Hirao , Y. Ohishi , K. Shimizu, A. Machida, K. Aoki
2010/7/21	口頭発表	Synthesis and characteristics of hcp	N. Hirao,

	International symposium on metal-hydrogen systems MH2010 (Moscow)	iron hydride at high pressure	Y. Ohishi, T. Mitsui, T. Matsuoka, M. Seto, K. Aoki, K. Takemura, H. Yamagami
2010/7/26	ポスター発表 International conference of European High Pressure Research Group (EHPRG) 2011 (Sweden, Uppsala)	Structural and electrical transport properties of FeH _x under high pressures and low temperatures	T. Matsuoka , N. Hirao , Y. Ohishi , K. Shimizu, A. Machida, K. Aoki
2010/8/23	ポスター発表 International Center for Material Research (ICMR) kick-off Meeting on High Pressure Research (Santa Barbara, USA)	Structural and electrical transport properties of FeH _x under HP and LT conditions	T. Matsuoka , N. Hirao , Y. Ohishi , K. Shimizu , A. Machida, K. Aoki
2010/9/16	ポスター発表 日本分析化学会第 59 回年会	超高压下金属水素化反応の In-Situ 放射光メスバウアー分光	三井隆也, 増田亮, 瀬戸誠, 松岡岳洋, 平尾直久
2010/9/23	口頭発表 International Union of Crystallography (IUCr) commission on High Pressure 2010 Meeting (IUCr-HP) (Gatlinburg, TN, USA)	Energy-domain synchrotron radiation Mössbauer spectroscopy in the multimegabar pressure range and its application to Fe	N. Hirao, Y. Ohishi, T. Mitsui, M. Seto
2010/10/21	口頭発表 第 51 回高压討論会 (仙台)	強磁性 hcp-FeH _x の高压合成と磁気転移	平尾直久, 大石泰生, 三井隆也, 松岡岳洋, 瀬戸誠, 青木勝敏, 竹村謙一, 山上浩志
2010/10/21	口頭発表	高水素圧力下で出現する EuH _x	松岡岳洋, 平尾

	第 51 回高圧討論会 (仙台)	の新高圧相	直久, 大石泰生, 藤久裕司, 清水 克哉, 町田晃彦, 青木勝敏
2010/10/22	ポスター発表 第 51 回高圧討論会	3d 遷移金属水素化物(FeH, CoHx, NiHx)の圧力下 XMCD 測定	石松直樹, 七條 貴大, 松島康晴, 圓山裕, 河村直 己, 水牧仁一朗, 松岡岳洋, 圓谷 貴夫, 小口多美 夫, 竹村謙一
2010/10/28	ポスター発表 平成 36 年度 G-COE 若手秋の学校「量子物 性の解明と新機能」	On the Way to Metallic and Superconductive Phase of YH ₃	Zhenhua Chi, Huyen Nguyen, Takahiro Matsuoka, Tomoko Kagayama, Katsuya Shimizu
2010/11/8	ポスター発表 5th Asian Conference on High Pressure Research	On the Way to Metallic and Superconductive Phase of YH ₃	Zhenhua Chi, Huyen Nguyen, Takahiro Matsuoka, Tomoko Kagayama, Katsuya Shimizu
2011/3/29	ポスター発表 Study of Matters under Extreme Conditions (SMEC)2011 (Miami, USA)	Structural and Magnetic Properties of dense Iron Hydride	T. Matsuoka, Y. Ohishi, N. Hirao, T. Mitsui, K. Takemura, K. Shimizu, A. Machida, K. Aoki
2011/3/30	口頭発表 Study of Matters under Extreme Conditions (SMEC)2011 (Miami,	Hydrogen induced structural transitions of EuHx	T. Matsuoka, N. Hirao, Y. Ohishi, H. Fujihisa,

	USA)		T. Mitsui, R. Masuda, T. Yoda, M. Seto, K. Shimizu, A. Machida, K. Aoki
2011/3/	講演概要発表 日本物理学会 第66 回年次大会	GdFe ₂ の放射光による超高水素 圧下メスバウアー分光	三井隆也, 増田 亮, 瀬戸誠, 平尾 直久, 松岡岳洋

(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
2010/4/7	口頭発表 MRS Spring meeting	Magnetic state in iron hydride under pressure studied by X-ray magnetic circular dichroism at the Fe K-edge	N. Ishimatsu, Y. Matsushima, H. Maruyama, T. Tsumuraya, T. Oguchi, N. Kawamura, M. Mizumaki, T. Matsuoka, K. Takemura
2010/9/3-4	ポスター発表 水素若手研究会第五 回 研究会	3d 遷移金属 (Fe,Co,Ni) 水素化物 の圧力下 XMCD 測定	七條貴大, 石松 直樹, 松島康晴, 圓山裕, 河村直 己, 水牧仁一朗, 竹村謙一
2010/9/3-4	ポスター発表 水素若手研究会第五 回 研究会	水素化の進行が及ぼす LaH _x の電 子状態の変化	松島康晴, 石松 直樹, 七條貴大, 河村直己,, 圓山 裕
2010/10/22	ポスター発表 第 51 回高圧討論会	3d 遷移金属水素化物(FeH, CoH _x , NiH _x)の圧力下 XMCD 測定	石松直樹, 七條 貴大, 松島康晴, 圓山裕, 河村直 己, 水牧仁一朗, 松岡岳洋, 圓谷 貴夫, 小口多美

			夫, 竹村謙一
--	--	--	---------

(材料物性 G: 岐阜大学)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2010/7/20	ポスター発表 International Symposium on Metal-Hydrogen Systems (MH2010), (Moscow, Russia)	Pressure-Induced Phase Transformation of LaH ₃ Studied by Raman and UV-Visible Absorption Spectroscopy	T. Kume, N. Shimura, S. Sasaki, H. Shimizu, A. Machida, T. Watanuki, K. Aoki, K. Takemura
2010/10/20	口頭発表 第 51 回高圧討論会, 仙台	希土類水素化物 LaH ₃ の高圧ラマ ン散乱及び紫外可視吸収分光,	中本琢磨, 志村 直哉, 久米徹二, 佐々木重雄, 青 木勝敏, 綿貫徹, 町田晃彦, 竹村 謙一
2010/11/7	口頭発表 5th Asian Conference on High Pressure Research (Matsue, Japan)	Raman and Visible Absorption Study on Rare-Earth Trihydrides under High Pressure	T. Kume, N. Shimura, T. Nakamoto, 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(前川研))

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2010/7/20	ポスター発表 International Symposium on Meta-Hydrogen Systems MH2010 (Moscow)	In-situ NMR Observation of Hydrogen Absorption and Desorption Behavior for Metal Hydrides	H. Takamura, T. Takahara, R. Ohkura, M. Ando, H. Maekawa
2010/7/21	口頭発表	Halide stabilized LiBH ₄ : a room	H. Maekawa

	International Symposium on Meta-Hydrogen Systems MH2010 (Moscow)	temperature lithium fast-ion conductor	
2010/8/15	口頭発表 Solid State Protonic Conductors 15 (Santa Barbara)	Local structure and hydride-ion transport in MgY_2H_8	H. Takamura, K. Kurosu, A.Hatakeyama, H. Maekawa
2010/8/19	口頭発表 The 5th LANL-NEDO-AIST Workshop for Hydrogen	NMR Studies of fast Li ion conductor $LiBH_4$ and related compounds	H. Takamura, H. Maekawa
2010/9/27	口頭発表 日本金属学会 2010 年秋期 (第 147 回) 大会	高速リチウムイオン伝導体の活性化体積	黒沼洋太, 前川英己, 高村仁, 松尾元彰, 折茂慎一
2010/11/26	口頭発表 第 36 回固体イオニクス討論会	高圧下における $LiBH_4$ のリチウムイオン伝導特性	黒沼洋太, 松尾元彰, 折茂慎一, 前川英己, 高村 仁
2010/12/18	招待講演 PACIFICHEM 2010	Solid-state NMR analysis of defects in energy conversion materials	H. Maekawa, I. Oikawa, M. Ando

(材料物性 G: 東北大学 大学院工学研究科(亀川研))

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2010/12/9	口頭発表 材料における水素有効利用研究会 平成 22 年度研究会	超高压法で合成された $Mg-Zr-A$ ($A=Li, Na, K$) 水素化物の結晶構造と水素貯蔵特性	竹市信彦, 志田賢二, 楊肖, 栗山信宏, 境哲男
2011/3/8-9	ポスター発表 International Symposium on Advanced Nanostructured Materials for Clean Energy	Crystal structure and hydrogen storage properties of $Mg-Zr$ hydrides synthesized by ultrahigh-pressure technique	K. Shida, N. Takeichi, N. Kuriyama, N. Kitamura, T. Saka

(計算科学G【88件】：産業技術総合研究所) (重複を除く)

発表年月日	大会名等	タイトル	発表者
2010.6.7-12	MATH/CHEM/COMP 2010, The 25th International Course & Conference on the Interfaces among Mathematics, Chemistry & Computer Sciences (Dubrovnik, Croatia) 口頭発表	Path integral molecular dynamics for hydrogen adsorption site of zeolite-templated carbon with semi-empirical PM3 potential	K. Suzuki, M. Kayanuma, M. Tachikawa, H. Ogawa, H. Nishihara, T. Kyotani, U. Nagashima
2010.6.18	3rd French-Japanese Workshop on Computational Methods in Chemistry (Strasbourg, France) 口頭発表	Theoretical Study on Hydrogen Adsorption and Diffusion in Spillover Process on Curved Surface of Microporous Carbon	M. Kayanuma, U. Nagashima, H. Nishihara, T. Kyotani, H. Ogawa
2010.6.18	3rd French-Japanese Workshop on Computational Methods in Chemistry (Strasbourg, France) 口頭発表	Nuclear quantum effect on hydrogen adsorption site of zeolite-templated carbon model using path integral molecular dynamics	K. Suzuki, M. Kayanuma, M. Tachikawa, H. Ogawa, H. Nishihara, T. Kyotani, U. Nagashima
2010.6.29-7.2	ESPA 2010, the 7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (Oviedo, Spain) ポスター発表	Theoretical Study on Hydrogen Adsorption and Diffusion in Spillover Process on Curved Surface of Microporous Carbon	K. Suzuki, M. Kayanuma, U. Nagashima, H. Nishihara, T. Kyotani, H. Ogawa
2010.7.1	Renewable energy 2010 (Yokohama) 口頭発表	MD imulation of hydrogen absorption in metallic nanoparticles	H. Ogawa, M. Katagiri
2010.7.4-9	European Conference on Atoms Molecules and Photons (Salamanca, Spain) ポスター発表	Theoretical Study on Hydrogen Adsorption and Diffusion in Spillover Process on Curved Surface of Microporous Carbon	K. Suzuki, M. Kayanuma, H. Ogawa, H. Nishihara,

			T. Kyotani, U. Nagashima
2010.7.20	Metal-hydrogen 2010 (Moscow) 口頭発表	Simulation study on structure variation of metallic nanoparticles due to hydrogenation	H.Ogawa
2010.7.21	Metal-hydrogen 2010 (Moscow) ポスター発表	Theoretical Study of Hydrogen Adsorption and Diffusion in Spillover Process on Microporous Carbon	K. Suzuki, M. Kayanuma, U. Nagashima, H. Nishihara, T. Kyotani, H. Ogawa
2010.7.21	Metal-hydrogen 2010 (Moscow) ポスター発表	Formation of AlH ₃ in hydrogen-aluminium system: A density functional study	P.T.V. Bac, H. Ogawa
2010.8.	北海道理論化学セミナー (釧路) 口頭発表	PM ₃ ポテンシャルを用いたゼ オライト鑄型炭素 (ZTC) の水 素吸着点に関する経路積分分 子動力学	長嶋雲兵
2010.9.	第4回分子科学討論会 (大阪) ポスター発表	炭素系水素貯蔵材料の理論的 解析	鈴木机倫
2010.9.25	日本金属学会 2010 年秋期 大会 (札幌) ポスター発表	Hydrogen adsorption on aluminium clusters: A DFT study	P.T.V. Bac, H. Ogawa
2010.9.26	日本金属学会 2010 年秋季 大会 (札幌) 口頭発表	ZTC への水素吸着の理論計算 (1) - 曲率とスピルオーバー	栢沼 愛, 鈴木机倫, 長嶋雲兵, 小川 浩, 西原洋知, 京谷 隆
2010.9.26	日本金属学会 2010 年秋季 大会 (札幌) 口頭発表	ZTC への水素吸着の理論計算 (2) - 経路積分法による有限温 度シミュレーション	鈴木机倫, 栢沼 愛, 長嶋雲兵, 小川 浩, 西原洋知, 京谷 隆
2010.10.	日本コンピューター化学	炭素系水素貯蔵材料の理論的	鈴木机倫

	会 2010 秋季年会 (新潟) 口頭発表	解析	
2010.10.20	11èmes Journées Francophones des Jeunes Physico-Chimistes 口頭発表	Theoretical study of adsorption and diffusion of atomic hydrogen on microporous carbon	K. Suzuki M. Kayanuma U. Nagashima H. Nishihara T. Kyotani H. Ogawa
2010.11.26	第 24 回分子シミュレーシ ョン討論会 (福井) 口頭発表	水素化に伴う金属ナノ粒子の 構造変化に関する分子シミュ レーション	小川 浩, フン バク
2010.11.29	MRS 2010 Fall Meeting (Boston) ポスター発表	Nuclear quantum effect on hydrogen adsorption site for zeolite-templated carbon (ZTC) using path integral molecular dynamics	K. Suzuki, M. Kayanuma, M. Tachikawa, H. Ogawa, H. Nishihara, T. Kyotani, U. Nagashima
2010.11.29	MRS 2010 fall meeting (Boston) ポスター発表	Computer Simulation on Structure Modification in Metallic Nanoparticles due to Hydrogenation	H.Ogawa, P.T.V. Bac
2010.11.29	MRS 2010 fall meeting (Boston) ポスター発表	Hydrogen atom adsorption on aluminium cllusters: An electronic structures density functional study	P.T.V. Bac, H. Ogawa
2010.12.2	MRS 2010 fall meeting (Boston) 口頭発表	Theoretical Study of Hydrogen Adsorption on Flat and Curved Surfaces in Zeolite-templated Carbon (ZTC)	M. Kyanamuma, K. Suzuki, U. Nagashima, H.ogawa, H. Nishihara, T. Kyotani
2010.12.12	Workshop on Computational Materials Science on Hydrogen storage (WCMS-HS) (Sendai) 口頭発表	Computational Studies in the Hydro-Star Project	H. Ogawa

2010.12.12	Workshop on Computational Materials Science on Hydrogen Storage (WCMS-HS) (Sendai) 口頭発表	First-principles Investigation of Hydrogen Diffusion into Aluminum Nanoclusters	P.T.V. Bac, H. Ogawa
2010.12.12	Workshop on Computational Materials Science on Hydrogen storage (WCMS-HS) (Sendai) 口頭発表	Nuclear Quantum Effect on Hydrogen Adsorption Site for Zeolite-Templated Carbon using Path Integral Molecular Dynamics	K. Suzuki, M. Kayanuma, M. Tachikawa, H. Ogawa, H. Nishihara, T. Kyotani, U. Nagashima
2010.12.15-20	Pacificchem 2010 (Honolulu) ポスター発表	Nuclear quantum effect on hydrogen adsorption site for zeolite-templated carbon (ZTC) using path integral molecular dynamics	K. Suzuki, M. Kayanuma, M. Tachikawa, H. Ogawa, H. Nishihara, T. Kyotani, U. Nagashima
2011.1.	第6回稲盛フロンティア 研究講演会 (福岡) 口頭発表	ゼオライト鋳型炭素 (ZTC) の 水素吸着点に関する経路積分 分子動力学	長嶋雲兵
2011.1.24	5th Int. Symposium Hydrogen and Energy (Stoos, Switzerland) ポスター発表	First-principles investigation of hydrogen adsorption and diffusion on palladium icosahedral clusters	P.T.V. Bac, H. Ogawa
2011.2.16	International Symposium on Computational Science 2011 口頭発表	Theoretical investigations of hydrogen diffusion into metallic nanoparticles	P.T.V. Bac, H. Ogawa

(計算科学G：物質・材料研究機構)

発表年月日	大会名等	タイトル	発表者
-------	------	------	-----

2010/6/22	ポスター発表 13th International Conference on Theoretical Aspects of Catalysis, Matsushima, Japan	First Principles Study of the Hydrogen Storage Mechanism of RNi5 (R=La, Ce, Pr, Nd, and Sm)	Shigeki Saito, Masahiko Katagiri, Vasileios Tserolas Jun Nakamura, Yasushi Takeuchi, Hidehiro Onodera
2010/6/23	ポスター発表 13th International Conference on Theoretical Aspects of Catalysis, Matsushima, Japan	Dynamical Stability and Hydrogen Amount in Hydrogen Storage Materials	Masahiko Katagiri, Shigeki Saito
2010/7/1	口頭発表 Renewable Energy 2010, Yokohama, Japan	MD simulation of hydrogen absorption in metallic nanoparticles	Hiroshi Ogawa, Masahiko Katagiri
2010/11/29	ポスター発表 2010 MRS fall meeting, Boston, USA	Structural Stability of AlH3 as Hydrogen Storage Material	Masahiko Katagiri, Shigeki Saito
2010/12/10	ポスター発表 5th General Meeting of ACCMS-VO, Sendai, Japan	Development of Aluminum Hydrogen Storage Materials	Masahiko Katagiri
2010/12/15	ポスター発表 Pacifichem 2010, Hawaii, USA	Structural Stability of AlH3 as Hydrogen Storage Material	Masahiko Katagiri

(計算科学G：東北大学金属材料研究所)

発表年月日	大会名等	タイトル	発表者
平成 22 年 4 月 7 日	MRS Spring 2010 (口頭発表)	First-Principles Calculations on Alkali Atom Doping to Enhance the Storage Capacity of Materials	H. Mizuseki, N. S. Venkataramanan, R. Sahara, and Y. Kawazoe
平成 22 年 5 月 14 日	ナノ学会第 8 回大会(口 頭発表)	第一原理計算による新規 水素貯蔵材料の研究	水関博志、N. S. Venkataramanan、陳 剛、M. Khazaei、佐原 亮二、川添良幸
平成 22 年 5 月 14 日	ナノ学会第 8 回大会 (口頭発表)	Hydrogen Adsorption on Ni-Metal (M= Late transition metals) Hydrides: A Cluster Approach	N. S. Venkataramanan、佐原 亮二、水関博志、川 添良幸
平成 22 年 5 月 14 日	ナノ学会第 8 回大会(口 頭発表)	全電子混合基底法プログ ラム TOMBO による水素貯 蔵材料の開発	佐原亮二、N. S. Venkataramanan、水関 博志、M. H. F. Sluter、 大野かおる、川添良 幸
平成 22 年 5	World Hydrogen Energy	Mixed H2-CH4 Hydrates as	R. V. Belosludov, O. S.

月 16-21 日	Conference 2010 (口頭発表)	Materials for Hydrogen Storage	Subbotin, H. Mizuseki, Y. Kawazoe, and V. R. Belosludov (要確認)
平成 22 年 7 月 1 日	Renewable Energy 2010 International Conference (口頭発表)	Density Functional Theory Study on the Hydrogen Storage of the Lithium Functionalized MOF-5	H. Mizuseki, N. S. Venkataramanan, R. Sahara, and Y. Kawazoe
平成 22 年 7 月 1 日	Renewable Energy 2010 International Conference (口頭発表)	Hydrogen Storage in Clathrate Hydrate: Molecular Level Description of Thermodynamics Properties	R. Belosludov, O. Subbotin, H. Mizuseki, V. Belosludov, and Y. Kawazoe
平成 22 年 7 月 21 日	International Symposium on Metal-Hydrogen Systems (MH2010) (口頭発表)	Theoretical Study on Improved Hydrogen Storage Materials	H. Mizuseki, N. S. Venkataramanan, R. Sahara, G. Chen, M. Khazaei, and Y. Kawazoe
平成 22 年 7 月 21 日	International Symposium on Metal-Hydrogen Systems (MH2010) (口頭発表)	Binding Energy Estimation of Hydrogen Storage Materials by All - Electron Mixed - Basis Program TOMBO	R. Sahara, N. S. Venkataramanan, H. Mizuseki, M. Sluiter, K. Ohno, and Y. Kawazoe
平成 22 年 7 月 27 日	東北大学金属材料研究所シンポジウム「計算材料科学の展望: 次世代スパコンによる飛躍を目指して」(口頭発表)	超大規模第一原理計算による新規水素貯蔵材料探索	水関博志
平成 22 年 8 月 22-26 日	240th ACS National Meeting (口頭発表)	Theoretical Description of Phase Diagrams of Hydrogen Clathrate Hydrates	R. V. Belosludov, O. S. Subbotin, H. Mizuseki, Y. Kawazoe, and V. R. Belosludov (要確認)
平成 22 年 9 月 5-10 日	12th International Conference on the Physics and Chemistry of Ice (口頭発表)	Theoretical Aspects of Hydrogen storage in Clathrate Hydrates	R. V. Belosludov, O. S. Subbotin, H. Mizuseki, Y. Kawazoe, and V. R. Belosludov
平成 22 年 9 月 26 日	日本金属学会 2010 年秋期大会 (口頭発表)	理論計算による水素ハイドレートの物理的および化学的性質の解明	R. V. Belosludov, O. S. Subbotin, 水関博志, V. R. Belosludov, 川添良幸
平成 22 年 9 月 27 日	日本金属学会 2010 年秋期大会 (口頭発表)	第一原理計算による新規水素貯蔵材料探索	水関博志, N. S. Venkataramanan, A. Suvitha, 陳剛, M. Khazaei, 佐原亮二, 川添良幸
平成 22 年 12 月 12 日	Workshop on Computational Materials Science on Hydrogen Storage (WCMS-HS) (招待講演)	Prediction of Structure, Composition and Phase Behavior of Helium Clathrate Hydrates	V. R. Belosludov
平成 22 年 12 月	Workshop on Computational Materials	Theoretical Study of Hydrogen Storage Materials	R. Sahara

月 13 日	Science on Hydrogen Storage (WCMS-HS) (口頭発表)	using All-electron Mixed-basis Program TOMBO	
平成 22 年 12 月 15 日	Pacificchem2010 (口頭発表)	Ab Initio Study on Improved Hydrogen Storage Materials	H. Mizuseki, N. Venkataramanan, R. Sahara, G. Chen, M. Khazaei, and Y. Kawazoe
平成 22 年 12 月 18 日	Pacificchem2010 (口頭発表)	Hydrogen Storage in Metal Organic Frameworks by Ab Initio Calculations	H. Mizuseki, N. S. Venkataramanan, R. Sahara, and Y. Kawazoe
平成 23 年 3 月 25 日	日本金属学会 2011 年春期大会 (口頭発表)	第一原理計算によるアルカリ金属をドーピングした新規水素貯蔵材料探索と評価	水関博志、N. S. Venkataramanan、陳剛、M. Khazaei、佐原亮二、川添良幸
平成 23 年 3 月 25 日	日本金属学会 2011 年春期大会 (口頭発表)	全電子混合基底法プログラム TOMBO による新規水素貯蔵材の開発	佐原亮二、水関博志、M. H. F. Sluiter、大野かおる、川添良幸
平成 22 年 4 月 7 日	MRS Spring 2010 (ポスター発表)	Theoretical study of hydrogen storage materials using all-electron mixed-basis program TOMBO	R. Sahara, H. Mizuseki, M. H. F. Sluiter, K. Ohno, and Y. Kawazoe
平成 22 年 5 月 13 日	ナノ学会第 8 回大会 (ポスター発表)	全電子混合基底法プログラム TOMBO による水素貯蔵材料の開発	佐原亮二、N. S. Venkataramanan、水関博志、M. H. F. Sluiter、大野かおる、川添良幸
平成 22 年 5 月 14 日	ナノ学会第 8 回大会 (ポスター発表)	Hydrogen Storage in Organic Porous Cages: A Multi-scale Theoretical Investigation	N. S. Venkataramanan、佐原亮二、水関博志、川添良幸
平成 22 年 5 月 27 日	金属材料研究所第 119 回講演会 (ポスター発表)	Hydrogen Storage in Organic Porous Cages: A Multi-scale Theoretical Investigation	N. S. Venkataramanan, R. Sahara, H. Mizuseki, and Y. Kawazoe
平成 22 年 7 月 21 日	International Symposium on Metal-Hydrogen Systems (MH2010) (ポスター発表)	Phase diagrams of Hydrogen Clathrate Hydrates: Theoretical aspects of Hydrogen Storage Application	R. V. Belosludov, O. S. Subbotin, H. Mizuseki, V. R. Belosludov, and Y. Kawazoe
平成 22 年 9 月 7 日	2nd International Conference on Metal-Organic Frameworks and Open Framework Compounds (MOF2010) (ポスター発表)	Theoretical Study for Improving Hydrogen Storage on Metal-Organic Framework	H. Mizuseki, N. S. Venkataramanan, R. Sahara, and Y. Kawazoe
平成 22 年 9 月	Psi_k-2010 conference	First Principles Calculations	H. Mizuseki, N. A.

月 14 日	(ポスター発表)	on Improved Hydrogen Storage Materials	Venkataramanan, R. Sahara, G. Chen, M. Khazaei, and Y. Kawazoe
平成 22 年 9 月 14 日	Psi_k-2010 conference (ポスター発表)	Binding Energy Estimation of Hydrogen Storage Materials by All-electron Mixed Basis Program TOMBO	R. Sahara, N. S. Venkataramanan, H. Mizuseki, M. Sluiter, K. Ohno, and Y. Kawazoe
平成 22 年 12 月 20 日	第 20 回日本 MRS 学術シンポジウム (ポスター発表)	Binding Energy Estimation of Hydrogen Storage Materials by All-electron Mixed Basis Program TOMBO	R. Sahara, N. S. Venkataramanan, H. Mizuseki, M. Sluiter, K. Ohno, and Y. Kawazoe
平成 23 年 1 月 5 日	物性研・CMSI・次世代ナノ情報 合同研究会 「計算物質科学の課題と展望」 2 件 (ポスター発表)	全電子混合基底法プログラム TOMBO による新規水素貯蔵材料の開発	佐原亮二、水関博志、M. H. F. Sluiter、大野かおる、川添良幸
平成 23 年 1 月 5 日	物性研・CMSI・次世代ナノ情報 合同研究会 「計算物質科学の課題と展望」 2 件 (ポスター発表)	第 2 ゲストを含む水素ハイドレートの物理的および化学的性質の解明	水関博志、R. V. Belosludov、O. S. Subbotin、V. R. Belosludov、川添良幸
平成 23 年 1 月 17 日	次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム 2010 および第 1 回戦略プログラム 5 分野合同ワークショップ (ポスター発表)	全電子混合基底法プログラム TOMBO による新規水素貯蔵材料の開発	佐原亮二、水関博志、M. H. F. Sluiter、大野かおる、川添良幸
平成 23 年 2 月 22 日	ナノ分野グランドチャレンジ研究開発 第 5 回公開シンポジウム (ポスター発表)	全電子混合基底法プログラム TOMBO の開発と新規水素貯蔵材設計への応用	佐原亮二、水関博志、M. H. F. Sluiter、大野かおる、川添良幸
平成 22 年 1 月 12 日	ACCMS-VO4 (ポスター発表)	Chemical Engineering of Prehydrogenated C and BN-Sheets by Li: Application in Hydrogen Storage	M. Khazaei, M. S. Bahramy, N. S. Venkataramanan, H. Mizuseki, and Y. Kawazoe
平成 22 年 1 月 12 日	ACCMS-VO4 (ポスター発表)	Hydrogen Adsorption on Ni-Interstitial Metal Hydrides: A Cluster Approach	N. S. Venkataramanan, R. Sahara, H. Mizuseki, Y. Kawazoe
平成 22 年 3 月 2 日	第 5 回 日中水素貯蔵材料セミナー (ポスター発表)	Theoretical Study on Alkali Atom Doping to Enhance the Storage Capacity of Materials	H. Mizuseki, N. S. Venkataramanan, G. Chen, R. Sahara, and Y. Kawazoe
平成 22 年 3 月 2 日	第 5 回 日中水素貯蔵材料セミナー (ポスター発表)	Theoretical Study of Hydrogen Storage Materials by All-electron Mixed-basis Method	R. Sahara, H. Mizuseki, M. Sluiter, K. Ohno, and Y. Kawazoe

平成 22 年 3 月 4 日	次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発 第 4 回公開シンポジウム (ポスター発表)	Quantum Chemical Studies on the Hydrogen Storage of Calixarene	N. S. Venkataramanan, R. Sahara, H. Mizuseki, and Y. Kawazoe
平成 22 年 3 月 10 日	次世代スパコン物性科学分野研究会「新物質・エネルギー創成」(ポスター発表)	第一原理計算による持続可能なエネルギー材料評価	水関博志、N. S. Venkataramanan、陳剛、R. V. Belosludov、A. Suvitha、佐原亮二、川添良幸
平成 22 年 3 月 10 日	次世代スパコン物性科学分野研究会「新物質・エネルギー創成」(ポスター発表)	全電子混合基底法プログラム TOMBO を用いた水素貯蔵材料の開発	佐原亮二、水関博志、Marcel Sluiter、大野かおる、川添良幸

(計算科学 G : 東北大学多元物質科学研究所)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2010/6/18	3rd French-Japanese Workshop on Computational Methods in Chemistry 講演	Nuclear quantum effect on hydrogen adsorption site of zeolite-templated carbon model using path integral molecular dynamics	K. Suzuki M. Kayanuma M. Tachikawa H. Ogawa H. Nishihara T. Kyotani U. Nagashima
2010/6/18	3rd French-Japanese Workshop on Computational Methods in Chemistry 講演	Theoretical Study on Hydrogen Adsorption and Diffusion in Spillover Process on Curved Surface of Microporous Carbon	M. Kayanuma U. Nagashima H. Nishihara T. Kyotani H. Ogawa
2010/6	MATH/CHEM/COMP 2010, The 25th International Course & Conference on the Interfaces among Mathematics, Chemistry & Computer Sciences 講演	Path integral molecular dynamics for hydrogen adsorption site of zeolite-templated carbon with semi-empirical PM3 potential	K. Suzuki M. Kayanuma M. Tachikawa H. Ogawa H. Nishihara T. Kyotani U. Nagashima
2010/6	European Conference on Atoms Molecules and Photons ポスター発表	Theoretical Study on Hydrogen Adsorption and Diffusion in Spillover Process on Curved Surface of Microporous Carbon	K. Suzuki M. Kayanuma H. Ogawa H. Nishihara T. Kyotani U. Nagashima
2010/7/20	蔵王10研究会 講演	High-Pressure Hydrogen Storage in Nanoporous Carbons	H. Nishihara S. Ittisanronnachai L.-X. Li T. Kyotani M. Ito
2010/7/20	蔵王10研究会 ポスター発表	Spring-like behavior of 3D graphene network	K. Yamamoto H. Nishihara H. Itoi

			S. Ittisanronnachai T. Kyotani
2010/7/21	International Symposium on Metal-Hydrogen Systems (MH2010) ポスター発表	Nuclear quantum effect on hydrogen adsorption site of zeolite-templated carbon model using path integral molecular dynamics	K. Suzuki M. Kayanuma M. Tachikawa H. Ogawa H. Nishihara T. Kyotani U. Nagashima
2010/9/5	第39回フラーレン・ナ ノチューブ総合シンポ ジウム 講演	Reversible Contraction-Recovery of 3D Nanographene-Network Material	H. Nishihara K. Yamamoto H. Itoi S. Ittisanronnachai T. Kyotani
2010/9/17	第四回分子科学討論会 ポスター発表	炭素系水素貯蔵材料の水素吸 着に関する理論的研究	鈴木机倫, 栢沼愛, 立川仁典, 小川浩, 西原洋知, 京谷隆, 長嶋雲兵
2010/9/25	平成22年度化学系学協 会東北大会 ポスター発表	機械的圧縮によるマイクロポー ラスカーボンの細孔径可逆制 御	山本健太郎, 西原洋 知, 京谷隆
2010/9/26	日本金属学会 2010年 秋季大会 講演	ZTC への水素吸着の理論計 算(2)—経路積分法による有限 温度シミュレーション	鈴木机倫, 栢沼愛, 長嶋雲兵, 小川浩, 西原洋知, 京谷隆
2010/9/26	日本金属学会 2010年 秋季大会 講演	ZTCへの水素吸着の理論計算 (1) — 曲率とスピルオーバ ー	栢沼愛, 鈴木机倫, 長嶋雲兵, 小川浩, 西原洋知, 京谷隆
2010/10/20	11èmes Journées Francophones des Jeunes Physico-Chimistes 講演	Theoretical study of adsorption and diffusion of atomic hydrogen on microporous carbon	K. Suzuki M. Kayanuma U. Nagashima H. Nishihara T. Kyotani H. Ogawa
2009/10/23	日本コンピュータ化学 会2010秋季年会 ポスター発表	炭素系水素貯蔵材料の理論的 研究	鈴木机倫, 栢沼愛, 立川仁典, 小川浩, 西原洋知, 京谷隆, 長嶋雲兵
2010/11/19	NanoThailand 2010 ポスター発表	Effect of Pt Particle Size and Dispersion on H ₂ Spillover in Pt-Loaded Zeolite-Templated Carbons at 25 °C and Low Pressure	S. Ittisanronnachai H. Nishihara Li-X. Li M. Ito T. Kaburagi M. Uchiyama T. Kyotani
2010/11/29	MRS 2010 fall meeting ポスター発表	Nuclear quantum effect on hydrogen adsorption site for zeolite-templated carbon (ZTC) using path integral molecular dynamics	K. Suzuki M. Kayanuma M. Tachikawa H. Ogawa H. Nishihara T. Kyotani U. Nagashima

2010/12/1	第37回 炭素材料学会 年会 ポスター発表	ゼオライト鑄型炭素の細孔径 可逆制御とそれに伴うガス吸 着特性変化	山本健太郎、西原洋 知、伊藤仁、内山誠、 京谷隆
2010/12/1	第37回 炭素材料学会 年会 ポスター発表	Study of Hydrogen Storage through Spillover in Pt-loaded Porous Carbons	Somlak Ittisanronnachai、 Hiroto Nishihara、 Masashi Ito、 Makoto Uchiyama、 Takashi Kyotani
2010/12/2	MRS 2010 fall meeting 講演	Theoretical Study of Hydrogen Adsorption on Flat and Curved Surfaces in Zeolite-templated Carbon (ZTC)	M. Kyanamuma K. Suzuki U. Nagashima H. Ogawa H. Nishihara T. Kyotani
2010/12/12	The Fifth General Meeting of ACCMS-VO 講演	Nuclear quantum effect on hydrogen adsorption site for zeolite-templated carbon (ZTC)	K. Suzuki M. Kayanuma M. Tachikawa H. Ogawa H. Nishihara T. Kyotani U. Nagashima
2010/12/12	The Fifth General Meeting of ACCMS-VO 講演	Study of Hydrogen Storage through Spillover in Pt-loaded Zeolite-Templated Carbon	S. Ittisanronnachai H. Nishihara M. Ito M. Uchiyama T. Kyotani
2010/12/17	Pacificchem 2010 ポスター発表	Nuclear quantum effect on hydrogen adsorption site for zeolite-templated carbon (ZTC) using path integral molecular dynamics	K. Suzuki M. Kayanuma M. Tachikawa H. Ogawa H. Nishihara T. Kyotani U. Nagashima

(計算科学 G : 大阪大学)

なし

(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
2010/4/5	口頭発表 Materials Research Society (MRS) 2010 (San Francisco)	High-intensity neutron total scattering instrument (NOVA) for structural studies of hydrogen storage materials at J-PARC”	大友季哉
2010/7/29	口頭発表 エレクトロニクス DAQ セミナー2010 (KEK)	データ収集システムの実 際	大下英敏
2010/9/26-29	口頭発表 (招待講)	Hydrogen storage materials	大友季哉

	演) Neutrons for Global Energy Solutions (Bonn)	study by neutron total scattering	
2010/9/26	口頭発表 日本金属学会秋期 大会 (北海道大学)	高強度全散乱装置 NOVA による水素貯蔵材料の構 造研究	池田一貴、大友季哉、三 沢正勝、金子直勝、大下 英敏、坪田雅己、瀬谷智 洋、鈴谷賢太郎、福永俊 晴、伊藤恵司
2010/9/24	口頭発表 日本物理学会秋期 大会 (大阪府立大 学)	J-PARC 高強度全散乱装置 (NOVA) のコミッショ ニングの現状	大下英敏、大友季哉、三 沢正勝、金子直勝、池田 一貴、坪田雅己、瀬谷智 洋、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、鈴 谷賢太郎、社本真一、高 田慎一、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
2010/10/27-28	口頭発表 (招待講 演) 第 8 回 水素量子ア トミクス研究会 (愛媛大学)	高強度中性子全散乱装置 (NOVA) による水素貯蔵 材料研究	大友季哉
2010/11/24	S 型課題研究会 (東 海 1 号館)	高強度全散乱装置による 水素貯蔵機構の基本原 理解明	大友季哉他 約 30 名
2010/12/7-8	ポスター発表 第 10 回 物質構造 科学研究所シンポ ジウム (つくば)	Commissioning for the High Intensity Total Diffractometer (NOVA) at J-PARC	大下英敏
2010/12/7-8	ポスター発表 第 10 回 物質構造 科学研究所シンポ ジウム (つくば)	Structure Analysis of Aluminum Hydride by the High Intensity Total Diffractometer (NOVA)	池田一貴
2010/12/7-8	ポスター発表 第 10 回 物質構造 科学研究所シンポ ジウム (つくば)	Structural Study for Lithium Aluminum Amide by the High Intensity Total Diffractometer, NOVA	坪田雅己
2010/12/15-20	口頭発表 (招待講 演) PACIFIC CHEM 2010 (Honolulu)	Structural characterization of hydrogen storage materials by neutron total scattering instrument (NOVA)	大友季哉
2010/12/9-11	ポスター発表	J-PARC 高強度全散乱装置	大下英敏、大友季哉、金

	日本中性子科学会 第10回年会（東北 大学）	(NOVA) のコミッショ ニング	子直勝、池田一貴、坪田 雅己、瀬谷智洋、鈴谷賢 太郎、他 NOVA グルー プ
2010/12/9-11	ポスター発表 日本中性子科学会 第10回年会（東北 大学）	高強度全散乱装置 (NOVA) によるアルミニウム水素 化物の構造研究	池田一貴、大友季哉、大 下英敏、金子直勝、坪田 雅己、瀬谷智洋、鈴谷賢 太郎、李海文、千星聡、 折茂慎一
2010/12/9-11	ポスター発表 日本中性子科学会 第10回年会（東北 大学）	高強度全散乱装置 (NOVA) によるリチウムアルミア ミドの構造解析	坪田雅己、大友季哉、池 田一貴、大下英敏、金子 直勝、瀬谷智洋、鈴谷賢 太郎、小野泰輔、山中俊 幸、市川貴之、小島由継
2010/12/9-11	ポスター発表 日本中性子科学会 第10回年会（東北 大学）	J-PARC NOVA を利用した 高圧中性子回折による希 土類水素化物の研究	本田充紀、服部高典、佐 野亜沙美、町田晃彦、片 山芳則、内海渉、有馬寛、 小松一生、大下英敏、大 友季哉
2011/1/17-18	口頭発表 第2回 MLF シンポ ジウム (KEK)	高強度全散乱装置 (NOVA) の性能評価	大友季哉
2011/1/17-18	ポスター発表 第2回 MLF シンポ ジウム (KEK)	GEM を用いた中性子ビー ムモニターの動作安定性 評価	大下英敏、大友季哉、金 子直勝、池田一貴、坪田 雅己、瀬谷智洋、鈴谷賢 太郎、他 NOVA グルー プ
2011/1/17-18	ポスター発表 第2回 MLF シンポ ジウム (KEK)	高強度全散乱装置 (NOVA) によるアルミニウム水素 化物の構造解析	池田一貴、大友季哉、大 下英敏、金子直勝、坪田 雅己、瀬谷智洋、鈴谷賢 太郎、李海文、千星聡氏、 折茂慎一、他 NOVA グ ループ
2011/1/17-18	ポスター発表 第2回 MLF シンポ ジウム (KEK)	高強度全散乱装置 NOVA を利用した高圧中性子回 折による金属水素化物構 造研究	本田充紀、服部高典、町 田晃彦、有馬寛、佐野亜 沙美、片山芳則、青木勝 敏、小松一生、大下英敏、 大友季哉
2011/1/23-28	口頭発表（招待講 演） 5th International Symposium Hydrogen & Energy (Stoos, Switzerland)	Neutron Total Diffraction for Structural Studies of Hydrogen Storage Materials	大友季哉
2011/3/1	口頭発表 水素貯蔵材料フォー ラム 2011	水素貯蔵材料開発と中性 子散乱	大友季哉
2011/3/25-28	日本物理学会第 66	J-PARC 大強度全散乱装置	大下英敏、大友季哉、金

	<p>回年次大会（新潟大）</p> <p>注：震災のため中止されたが講演要旨により発表済みと学会より認定された。</p>	<p>（NOVA）の中性子モニターの安定性評価</p>	<p>子直勝、池田一貴、坪田雅己、瀬谷智洋、宇野彰二、鈴谷賢太郎</p>
--	--	-----------------------------	--------------------------------------

平成23年度【226件（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
2011/4/13	UK-SUC	Hydrogen Related R & D and Hydrogen Storage Materials in Japan	秋葉悦男
2011/4/26	MRS 2011 Spring Meeting 講演	Structural Studies of Hydrogen Storage Alloys using X-ray/Neutron Diffraction and Total Scattering	中村 優美子、Kim Hyunjeong、山崎 宰春、榊 浩司、Thomas Proffen、秋葉 悦男
2011/4/28	MRS 2011 Spring Meeting 講演	Site Occupation and Diffusion of Hydrogen in the BCT Monohydride Phases of V-Cr-H and V-Mo-H Systems Studied by ¹ H NMR	浅野 耕太、林 繁信、中村 優美子、秋葉 悦男
2011/5/16	日本顕微鏡学会第67回学術講演会 講演	LaNi ₅ 系金属間化合物およびその水素化物のTEM観察	松田潤子、中村優美子、秋葉悦男
2011/5/21	2011 International Conference on Materials for Renewable Energy & Environment	Hydrogen storage and transportation: Japanese scenario and R & D	秋葉悦男、李海文
2011/5/24	The 1st Asian Symposium on Hydrogen Storage Materials	Research and Development of Hydrogen Storage Materials in Japan	秋葉悦男
2011/5/27	水素貯蔵材料先端基盤研究事業検討会	水素貯蔵材料先端基盤研究事業(HYDRO-STAR)の概要と成果	秋葉悦男
2011/6/9	H2 EXPO 2011	Hydrogen/Electric Drive Developments in Japan	秋葉悦男
2011/6/29	経済産業省燃料電池勉強会	水素貯蔵材料先端基盤研究事業(HYDRO-STAR)の概要と成果	秋葉悦男
2011/7/18	Gordon Research Conference, Hydrogen-Metal Systems 講演	Hydrogen storage properties and hydrogen occupation tendencies in intermetallic compounds, AB ₃ , A ₂ B ₇ , and A ₅ B ₁₉	中村 優美子
2011/7/20	Gordon Research Conference on Hydrogen-Metal systems 講演	Direct imaging of hydrogen in metal hydride	J. Matsuda
2011/7/20	Gordon Research Conference on Hydrogen-Metal systems ポスター発表	Formation and recovery of vacancies in LaNi ₅ Cu studied using in-situ positron annihilation and X-ray diffraction	榊 浩司、中村 優美子、秋葉 悦男
2011/7/30	九州大学工学部機械工学部門公開講座	水素エネルギーの導入シナリオと水素貯蔵輸送技術	秋葉悦男

2011/8/24	XXII International Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography 講演	Understanding hydrogenation properties of various hydrogen storage materials from their local structure	Kim Hyunjeong、中村優美子、榎 浩司、秋葉 悦男、Thomas Proffen
2011/9/1	International workshop on positron studies of defects 2011 講演	Vacancy formation mechanism in LaNi ₅ Cu during hydrogenation studied using in-situ positron annihilation and X-ray diffraction measurements	榎 浩司、中村 優美子、秋葉 悦男
2011/9/6	IEA Task 22 meeting 講演	Synthesis and characterization of novel metal hydrides	秋葉悦男、内山直樹、李海文、松田潤子、浅野耕太、榎 浩利、榎 浩司、中村優美子
2011/11/7	日本金属学会 2011 秋期大会 講演	気相合成 Mg ファイバーの水素吸蔵機構の解析	松本愛子、浅野耕太、榎浩司、中村優美子
2011/11/9	日本金属学会 2011 秋期大会 講演	LaNi ₅ 系水素化物の TEM による微構造解析	松田 潤子、中村 優美子、秋葉 悦男
2011/11/9	日本金属学会 2011 秋期大会 講演	LaNi _{4.5} Al _{0.5} 合金の水素吸蔵反応過程における時分割 X 線回折測定	樋口 健介、町田 晃彦、片山 芳則、榎 浩司、中村 優美子
2011/11/9	日本金属学会 2011 秋期大会 講演	Mg, Ca を含む AB ₃ 型積層合金の水素化特性と構造変化	中村 優美子、山崎 宰春、榎 浩司、池田 一貴、大友 季哉
2011/11/9	日本金属学会 2011 秋期大会 講演	V-H 系 1 水素化物中の水素の占有サイトおよび拡散に及ぼす Cr および Mo 添加の影響	浅野 耕太、林 繁信、中村 優美子、秋葉 悦男
2011/11/9	日本金属学会 2011 秋期大会 講演	固体 NMR を用いた低温相 LiBH ₄ のダイナミクス解析	治村 圭子、林 繁信
2011/11/9	日本金属学会 2011 秋期大会 講演	固体 NMR による Ti _{0.1} V _{0.9} H _x Dy (x+y≈0.7) の電子構造解析	鈴木 陽、林 繁信
2011/11/9	日本金属学会 2011 秋期大会 講演	Searching for the structural origin of the excellent/poor cyclic properties of V-based bcc alloys	Kim Hyunjeong、榎 浩司、Jin Nakamura、中村 優美子、秋葉 悦男、Akihiko Machida、Tetsu Watanuki、Masakazu Aoki、Tatsuo Noritake、Thomas Proffen
2011/11/9	日本金属学会 2011 秋期大会 講演	中性子回折を用いた Mg _{2-x} PrxNi ₄ Dy (x=0.6, 1.0) の結晶構造・局所構造解析	榎 浩司、寺下尚克、Kim Hyunjeong、Thomas Proffen、角掛 繁、中村 優美子、秋葉 悦男
2011/11/16	第 50 回 NMR 討論会 記念国際シンポジウム	Reorientational motion of BD ₄ ion in LiBD ₄ as studied by solid-state NMR	治村 圭子、林 繁信

2011/11/16	第50回NMR討論会 記念国際シンポジウム	Study of phase structures in metal deuterides using two-dimensional one pulse spectroscopy	鈴木 陽、林 繁信
2011/12/15	材料における水素有効利用研究会 平成23年度研究会	侵入型水素貯蔵材料の反応機構	秋葉悦男、松田潤子
2012/1/8	日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム 講演	水素吸蔵合金のPDF解析 - 局所構造から水素吸蔵特性を理解する	Hyunjeong Kim
2012/1/30	Workshop on Physics of Hydrogen in Materials 講演	Structural Study on Metal hydride for Hydrogen Storage (tentative)	中村優美子

(非金属系 G : 広島大学)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2011/4-26-28	Poster Materials Research Society (MRS) 2011, Spring meeting, San Francisco, USA	Dehydrogenation of Sodium Amidoborane: Characterization by Solid-State NMR Spectroscopy	K. Shimoda Y. Zhang H. Miyaoka T. Ichikawa Y. Kojima
2011/4-26-28	Poster Materials Research Society (MRS) 2011, Spring meeting, San Francisco, USA	ab initio Calculation on MH+NH ₃ Hydrogen Storage System	A. Yamane F. Shimojo K. Hoshino T. Ichikawa Y. Kojima
2011/5/20-22	Oral 2011 - International Conference on Materials for Renewable Energy & Environment (Shanghai, China)	High-Purity Hydrogen Release Studies of Alkali Metal Amidoboranes Complexes	Y. Zhang
2011/5/23-26	Invited Lecture 1 st Asian Symposium on Hydrogen Storage Materials (Hangzhou, China)	NH ₃ BH ₃ -Based Composite Materials for Hydrogen Storage	Y. Kojima
2011/5/23-26	Oral 1 st Asian Symposium on Hydrogen Storage Materials (Hangzhou, China)	New Candidate for Hydrogen Storage	L. Zeng
2011/5/23-26	Poster	H ₂ desorption from MH+NH ₃	A. Yamane

	1 st Asian Symposium on Hydrogen Storage Materials (Hangzhou, China)	system: ab initio calculation	F. Shimojo K. Hoshino T. Ichikawa Y. Kojima
2011/5/23-26	Poster 1 st Asian Symposium on Hydrogen Storage Materials (Hangzhou, China)	Catalytic effect of Li_5TiN_3 , $\text{Li}_5\text{TiN}_3(\text{NH}_3)_x$, and $\text{TiCl}_3(\text{NH}_3)_x$ in the Li-N-H system on hydrogen storage properties	Y.-L. Teng T. Ichikawa Y. Kojima
2011/5/23-26	Poster 1 st Asian Symposium on Hydrogen Storage Materials (Hangzhou, China)	Synthesis of Alkali-metal Amidoboranes Complex for Hydrogen Production	Y. Zhang K. Shimoda T. Ichikawa Y. Kojima
2011/6/2-3	口頭発表 第3回 水素貯蔵材料研究会 (北海道大学, 札幌)	リチウム吸蔵合金を用いた水素貯蔵	市川 貴之
2011/6/2-3	口頭発表 第3回 水素貯蔵材料研究会 (北海道大学, 札幌)	固体NMRによる軽元素水素貯蔵物質のキャラクタリゼーション	下田景士
2011/7/17-22	Poster Gordon Research Conference, Hydrogen-Metal Systems 2011 -A Cross-Disciplinary View of Hydrogen Interactions- (Easton, USA)	Iron-carbon composite for H storage	Y. Kojima
2011/7/17-22	Poster Gordon Research Conference, Hydrogen-Metal Systems 2011 -A Cross-Disciplinary View of Hydrogen Interactions- (Easton, USA)	Lithium Hydrazide: A New Candidate for Hydrogen Storage	L. Zeng
2011/7/17-22	Poster Gordon Research Conference, Hydrogen-Metal Systems	Surface analysis of Alkali metal hydride thin film using the X-ray photoelectron spectroscopy	H. Yamamoto

	2011 -A Cross-Disciplinary View of Hydrogen Interactions- (Easton, USA)		
2011/8/1-5	Invited Lecture THERMEC'2011 (Quebec City, Canada)	Hydride-based nano-composite materials for hydrogen storage	Y. Kojima T. Ichikawa
2011/8/8-9	口頭発表 日本鉄鋼協会・日本金属学会 中国四国支部 鉄鋼第54回・金属第51回 合同講演大会 (岡山理科大学, 岡山)	Li-Ge 合金の水素貯蔵特性	河迫恵莉加, 市川貴之, 宮岡裕樹, 小島由継
2011/8/29-30	Keynote Lecture Asian-Core Sumer School on Hydrogen 2011 in SNU (6 th Symposium on Hydrogen for Young Scientists) (Seoul, Korea)	New Trends on Hydrogen Storage Research & Development	T. Ichikawa
2011/8/29-30	Poster Asian-Core Sumer School on Hydrogen 2011 in SNU (6 th Symposium on Hydrogen for Young Scientists) (Seoul, Korea)	Thermal Decomposition of NH_3BH_3 and MNH_2BH_3 ($M = \text{Li}$ and K): Solid State NMR Study	K. Shimoda K. Doi T. Nakagawa Y. Zhang H. Miyaoka T. Ichikawa Y. Kojima
2011/8/29-30	Poster Asian-Core Sumer School on Hydrogen 2011 in SNU (6 th Symposium on Hydrogen for Young Scientists) (Seoul, Korea)	Synthesis and Surface Analysis of Lithium Hydride Thin Film	H. Yamamoto H. Miyaoka T. Ichikawa Y. Kojima
2011/8/29-30	Poster Asian-Core Sumer School on Hydrogen 2011 in SNU (6 th Symposium on Hydrogen for Young Scientists) (Seoul, Korea)	Synthesis and Characterizations of LiNHNH_2 for Hydrogen Storage	L. Zeng K. Shimoda H. Miyaoka T. Ichikawa Y. Kojima

2011/8/29-30	Poster Asian-Core Summer School on Hydrogen 2011 in SNU (6 th Symposium on Hydrogen for Young Scientists) (Seoul, Korea)	Hydrogen storage properties of lithium germanium alloy	E. Kawasako T. Ichikawa H. Miyaoka Y. Kojima
2011/8/29-30	Poster Asian-Core Summer School on Hydrogen 2011 in SNU (6 th Symposium on Hydrogen for Young Scientists) (Seoul, Korea)	<i>ab initio</i> Simulation on Li-N-H system with catalyst	A. Yamane F. Shimojo K. Hoshino T. Ichikawa Y. Kojima
2011/9/4-8	Oral IEA HIA Task 22-Fundamental and applied hydrogen storage materials development (Copenhagen, Denmark)	Basic research on non-metallic hydrogen storage materials	Y. Kojima
2011/9/12-14	Oral NRF-JST(Japan-South Africa) Workshop (Stellenbosch, South Africa)	Composite Materials of Nitrogen-Based Hydrides for Hydrogen Storage	T. Ichikawa Y. Kojima
2011/11/7-9	口頭発表 日本金属学会秋期大会, 沖縄	第一原理計算によるボロン系水素貯蔵材料の NMR 化学シフトの予測	下田景士, 市川貴之, 小島由継
2011/11/7-9	口頭発表 日本金属学会秋期大会, 沖縄	Systematic analyses of alkali-metal hydride and ammonia borane mixture	Y. Zhang K. Shimoda T. Ichikawa Y. Kojima
2011/11/7-9	口頭発表 日本金属学会秋期大会, 沖縄	Improvement of Hydrogen Desorption Kinetics in the LiH-NH ₃ System by Doping KH	Y.-L. Teng T. Ichikawa H. Miyaoka Y. Kojima
2011/11/7-9	口頭発表 日本金属学会秋期大会, 沖縄	第一原理計算による LiH・NH ₃ 系への触媒の影響	山根阿樹, 下條冬樹, 星野公三, 市川貴之, 小島由継

2011/11/7-9	口頭発表 日本金属学会秋期大会, 沖縄	Study on the Decomposition Pathway of Lithium Hydrazide	L. Zeng K. Shimoda H. Miyaoka T. Ichikawa Y. Kojima
2011/11/7-9	口頭発表 日本金属学会秋期大会, 沖縄	Effect of hydrogen isotope in the thermal properties of lithium amide	B. Paik T. Ichikawa Y. Kojima
2011/11/7-9	口頭発表 日本金属学会秋期大会, 沖縄	X線光電子分光測定を用いたアルカリ金属水素化物薄膜の分析	山本ひかる, 宮岡裕樹, 市川貴之, 小島由継
2011/11/7-9	口頭発表 日本金属学会秋期大会, 沖縄	Changing the Thermodynamics of Aluminum-based Hydrides	S.-S. Liu T. Ichikawa Y. Kojima

(非金属系 G : 北海道大学)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2011/5/23-26	口頭発表 1st Asian Symposium on Hydrogen Storage Materials, 中国	TEM study on Hydrogen Storage Materials	S. Isobe Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki
2011/5/23-26	ポスター発表 1st Asian Symposium on Hydrogen Storage Materials, 中国	Hydrogenation of Pd in The Environment Cell Holder of Conventional Transmission Electron Microscope	Y. Wang A. Umeda S. Isobe N. Hashimoto S. Ohnuki
2011/5/23-26	ポスター発表 1st Asian Symposium on Hydrogen Storage Materials, 中国	Observations on Decomposition Process of Lithium Alanate by Transmission Electron Microscopy	H. Yao S. Isobe Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki
2011/7/17-22	ポスター発表 Gordon Research Conference 2011, USA	TEM study on Hydrogen Storage Materials	S. Isobe Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki
2011/7/22	ポスター発表 日本金属学会・北海道	TEM investigation of hydrogen storage reaction in	T. Zhang S. Isobe

	支部会サマーセッション, 室蘭	Li ₂ NH materials	M. Dohkoshi Y. Wang, N. Hashimoto S. Ohnuki
2011/7/22	ポスター発表 日本金属学会・北海道支部会サマーセッション, 室蘭	酸化ニオブを添加したマグネシウムの水素化における微細構造変化	梅田 絢香, 若杉 剛伸, 磯部 繁人, 王永明, 橋本直幸, 大貫 惣明
2011/7/22	ポスター発表 日本金属学会・北海道支部会サマーセッション, 室蘭	アレイン脱水素化反応の律速段階の微細組織による検討	中川 祐貴, 磯部 繁人, 王永明, 橋本直幸, 大貫 惣明
2011/7/22	ポスター発表 日本金属学会・北海道支部会サマーセッション, 室蘭	透過電子顕微鏡によるTiCl ₃ 触媒を添加したLi ₂ NHの水素化反応機構の検討	李忠賢, 磯部繁人, 王永明, 橋本直幸, 大貫 惣明, Yu Zhang, 市川貴之, 小島由継
2011/8/29-30	ポスター発表 第6回水素若手研究会, ソウル	In-situ TEM observation of hydrogenation reaction in Mg catalyzed with Nb ₂ O ₅	R. Yamagami A. Umeda T. Wakasugi S. Isobe Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki
2011/8/29-30	ポスター発表 第6回水素若手研究会, ソウル	Investigation of dehydrogenation mechanism of AlH ₃	S. Chiba Y. Nakagawa S. Isobe Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki Z. Liang S. Liu T. Ichikawa Y. Kojima
2011/8/29-30	ポスター発表 第6回水素若手研究会, ソウル	Study on decomposition process of Sodium Alanate by means of Transmission	Y. Ikarashi H. Yao S. Isobe

		Electron Microscope	Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki
2011/8/29-30	ポスター発表 第6回水素若手研究会, ソウル	TEM investigation of de/hydrogenation reaction in Li-N-H materials	T. Zhang S. Isobe Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki
2011/8/29-30	ポスター発表 第6回水素若手研究会, ソウル	Microstructural change in dehydrogenation process of ammonia borane system	C.-H. Lee S. Isobe Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki T. Ichikawa Y. Kojima
2011/8/29-30	ポスター発表 第6回水素若手研究会, ソウル	HVEM Observation on the Hydrogenation and Oxidation Process of Mg-Nb ₂ O ₅ deposited composites: Investigation on the Orientation Relationship between MgH ₂ , MgO and Nb ₂ O ₅	T. Ma S. Isobe Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki
2011/8/29-30	ポスター発表 第6回水素若手研究会, ソウル	Observations on Decomposition Process of Lithium Alanate by Transmission Electron Microscopy	H. Yao S. Isobe Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki
2011/11/7-9	口頭発表 日本金属学会秋期大 会, 沖縄	Kinetics of Desorption and Chemical Bonding State on Catalyst Surface in MgH ₂	T. Ma S. Isobe E. Morita Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki T. Kimura T. Ichikawa Y. Kojima

2011/11/7-9	口頭発表 日本金属学会秋期大会，沖縄	Li-N-H 系水素貯蔵物質の反応機構	磯部繁人，堂腰美妃，張騰飛，王永明，橋本直幸，大貫惣明，日野聡，市川貴之，小島由継
2011/11/7-9	口頭発表 日本金属学会秋期大会，沖縄	TEM investigation of dehydrogenation reaction in Li-N-H materials	T. Zhang S. Isobe Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki
2011/11/7-9	口頭発表 日本金属学会秋期大会，沖縄	Al ₂ O ₃ 膜改質による AlH ₃ 脱水素化反応速度の改善	中川祐貴，磯部繁人，王永明，橋本直幸，大貫惣明，Zeng Liang ， Shusheng Liu, 市川貴之，小島由継
2011/11/7-9	ポスター発表 日本金属学会秋期大会，沖縄	超高压電子顕微鏡用環境セルの開発と水素貯蔵反応その場観察への応用	若杉剛伸，磯部繁人，梅田絢香，王永明，橋本直幸，大貫惣明，有田正志
2011/11/7-9	ポスター発表 日本金属学会秋期大会，沖縄	TEM を用いたボロハイドライド系水素貯蔵材料の熱分解過程 微視的観察	稲月 亮太，磯部繁人，王永明，橋本直幸，大貫惣明
2011/11/7-9	ポスター発表 日本金属学会秋期大会，沖縄	アルカリ（土類）金属-炭素複合物質の水素吸蔵生成物の検討	山田須弥人，磯部繁人，王永明，橋本直幸，大貫惣明，久保田光，宮岡裕樹，市川貴之，小島由継
2011/11/7-9	ポスター発表 日本金属学会秋期大会，沖縄	アンモニアボレインの熱分解反応の透過型電子顕微鏡観察	李忠賢，磯部繁人，王永明，橋本直幸，大貫惣明，Yu Zhang, 市川貴之，小島由継
2011/12/15 (予定)	口頭発表 顕微鏡学会北海道支部講演大会，札幌	Mg の水素化脱水素化反応に伴う微細組織変化	梅田絢香，若杉剛伸，磯部繁人，王永明，橋本直幸，大

			貫惣明
2011/12/15 (予定)	口頭発表 顕微鏡学会北海道支部 講演大会, 札幌	アレインの酸化膜厚と脱水 素化反応速度の相関	中川祐貴, 磯部繁 人, 王永明, 橋本直 幸, 大貫惣明, Zeng Liang, Shusheng Liu, 市川貴之, 小島 由継
2012/1/19-20 (予定)	口頭発表 日本金属学会北海道支 部講演大会	超高压電子顕微鏡用環境セ ルの開発と水素貯蔵反応そ の場観察	若杉剛伸, 磯部繁 人, 梅田絢香, 王永 明, 橋本直幸, 大貫 惣明, 有田正志
2012/1/19-20 (予定)	口頭発表 日本金属学会北海道支 部講演大会	ボロハイドライド系水素貯 蔵材料の熱分解過程 微視的観察	稲月 亮太, 磯部 繁人, 王永明, 橋本直幸, 大貫 惣明
2012/1/19-20 (予定)	口頭発表 日本金属学会北海道支 部講演大会	アルカリ(土類)金属-炭素 複合物質の水素吸蔵生成物 の同定	山田須弥人, 磯部繁 人, 王永明, 橋本直 幸, 大貫惣明, 久保 田光, 宮岡裕樹, 市 川貴之, 小島由継
2012/1/19-20 (予定)	口頭発表 日本金属学会北海道支 部講演大会	アンモニアボレインの熱分 解反応過程の微視的検討	李忠賢, 磯部繁人, 王永明, 橋本直幸, 大貫惣明, Yu Zhang, 市川貴之, 小島由継

(非金属系 G : 上智大学)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2011/6/26-30	口頭発表 DSL 2011, Algarve, Portugal	Defects in aluminum induced by electrochemical charging of hydrogen	H. Suzuki R. Hanawa N. Hanada K. Takai Y. Kubo M. Fujinami Y. Hagihara
2011/8/29-30	ポスター発表 6th Symposium on Hydrogen	Hydrogen generation by electrolysis of liquid	N. Hanada S. Hino

	for Young Scientist, Seoul National University	ammonia	T. Ichikawa H. Suzuki K. Takai Y. Kojima
2011/9/14-16	口頭発表 化学工学会 第 43 回秋季大会シンポジウム「アンモニアを用いた CO2 フリーエネルギーキャリアシステムの将来展望」(名古屋)	電気分解による液体アンモニアからの水素放出	花田 信子, Dong Baoxia, 日野聡, 市川貴之, 小島由継, 鈴木啓史, 高井健一
2011/11/7-9	口頭発表 日本金属学会 2011 年秋季大会 (沖縄)	EAM ポテンシャルと第一原理計算を用いた Al 中の水素と空孔の相互関係の解析	鈴木啓史、齋藤裕一郎、花田信子、高井健一、萩原行人、南部伸考
2011/11/7-9	口頭発表 日本金属学会 2011 年秋季大会 (沖縄)	昇温脱離曲線に基づく Al 中の水素存在状態の解析	鈴木啓史、小田島匡史、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)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2011/5/23-26	ポスター発表 1st Asian Symposium on Hydrogen Storage Materials (AHSM2011)	Mössbauer study on the hydrides of C15 RFe ₂ (R=Sm, Gd) compounds	R. Masuda, T. Mitsui, K. Itoh, K. Sakaki, H. Enoki, Y. Nakamura, Y. Kobayashi, S. Kitao, M. Seto
2011/5/23-26	口頭発表 1st Asian symposium on hydrogen storage materials (AHSM2011)	Neutron Diffraction Study of Pressure-Induced Phase Separation of LaD ₂	K. Aoki, A. Machida, M. Honda, T. Hattori, A. Sano, T. Watanuki, Y. Katayama, K. Komatsu,

			H. Arima, T. Otomo, M. Tsubota, T. Ichikawa, Y. Kojima, D.Y. Kim
2011/5/23-26	口頭発表 1st Asian symposium on hydrogen storage materials (AHSM2011)	High speed x-ray diffraction measurements of hydrogen storage alloy on hydrogen absorption and desorption processes	K. Higuchi, A. Machida, Y. Katayama, K. Sakaki, Y. Nakamura
2011/5/25	口頭発表 1st Asian symposium on Hydrogen Storage Materials (AHSM-2011)	Hydrogenation of aluminum at high pressures and temperatures	齋藤寛之, 町田 晃彦, 片山芳則, 青木勝敏
2011/6/14	ポスター発表 International Space Conference on Protection of Materials and Structures from Space Environment	Hydrogen removal from hydrogenated diamond-like carbon films by photon and energetic atomic oxygen beam exposures	K. Yokota, M. Tagawa, K. Matsumoto, Y. Furuyama, A. Kitamura, K. Kanda, M. Tode, A. Yoshigoe, Y. Teraoka
2011/7/18-19	ポスター発表 Gordon Research Conference 2011 “Hydrogen-Metal Systems”	Real-time-resolved Observation of Hydrogen Absorption Reaction for Pd Nanoparticles	D. Matsumura, Y. Okajima, Y. Nishihata, J. Mizuki
2011/7/18-19	ポスター発表 Gordon Research Conference 2011 “Hydrogen-Metal Systems”	Electronic states of amide hydrides	N. Kamakura, Y. Takeda, T. Okane, S.-i. Fujimori, Y. Saitoh, H. Yamagami, H. Miyaoka, M. Tsubota,

			T. Ichikawa, Y. Kojima, T. Muro, T. Kinoshita
2011/7/20-21	ポスター発表 Gordon Research Conference on Hydrogen-Metal Systems	Formation of NaCl-type mono-deuteride in La-D system at high pressure	A. Machida, M. Honda, T. Hattori, A. Sano-Furukawa , T. Watanuki, Y. Katayama, K. Aoki, K. Komatsu, H. Arima, H. Ohshita, T. Otomo, M. Tsubota, K. Doi, T. Ichikawa, Y. Kojima, D.Y. Kim
2011/8/29-30	ポスター発表 6th Symposium on Hydrogen for Young Scientists	Phase relationship and equation of state of TiH ₂ at high pressures and high temperatures	遠藤成輝, 齋藤 寛之, 町田晃彦, 片山芳則, 青木 勝敏
2011/8/22	口頭発表 第9回水素量子アトムク ス研究会	希土類金属水素化物の高圧 下における格子間水素の移 動と1水素化物の形成	町田晃彦, 本田 充紀, 服部高典, 佐野亜沙美, 綿 貫徹, 片山芳則, 青木勝敏, 小松 一生, 有馬寛, 大 下英敏, 大友季 哉, D. Y. Kim
2011/8/23-24	ポスター発表 XXII Congress and General Assembly of the International Union of	Neutron diffraction study on the pressure-induced cubic-tetragonal structural distortion in LaD ₂ using total	M. Honda, T. Hattori, A. Machida, A.

	Crystallography (IUCr2011)	scattering spectrometer NOVA	Sano-Furukawa, Y. Katayama, K.Aoki, H. Arima, K. Komatsu, H. Ohshita, T. Otomo
2011/8/24	口頭発表 XXII Congress and General Assembly of the IUCr (IUCr 2011) (Madrid, Spain)	Structural, magnetic and electrical properties of iron-hydride	N. Hirao, Y. Ohishi, T. Matsuoka, T. Mitsui, K. Takemura, K. Shimizu, A. Machida, K. Aoki
2011/8/27-28	ポスター発表 XXII Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography	Structure of liquid transition metal hydrogen alloys under high pressure	Y. Katayama, H. Saitoh, K. Aoki
2011/8/30	口頭発表 The 49th Meeting of the European High Pressure Research Group (EHPRG-49)	Phase Separation with Inter-Site Deuteron Transfer in LaD ₂	K. Aoki, A. Machida, M. Honda, T. Hattori, A. Sano, T. Watanuki, Y. Katayama, K. Komatsu, H. Arima, T. Otomo, M. Tsubota, T. Ichikawa, Y. Kojima, D.Y. Kim
2011/8/30	口頭発表 第72回応用物理学会学術 講演会	原子状酸素照射時における Si 添加高水素 DLC 膜からの 揮発性反応生成物脱離	田川雅人, 横田 久美子, 岸田和 博, 古山雄一, 戸

			出真由美, 吉越章隆, 寺岡有殿, T. K. Minton
2011/9/8	口頭発表 日本セラミックス協会 第24回秋季シンポジウム	放射光 X 線回折によるアルミニウム水素化反応のその場観察	齋藤寛之, 町田晃彦, 片山芳則, 青木勝敏
2011/9/23	ポスター発表 日本物理学会 2011 年秋季大会	触媒及び水素吸蔵反応中の Pd 微粒子動的構造	松村大樹, 岡島由佳, 西畑保雄, 水木純一郎
2011/9/23	口頭発表 日本物理学会 2011 年秋季大会	液体遷移金属水素合金の構造 II	片山芳則, 齋藤寛之, 青木勝敏
2011/9/23	口頭発表 日本物理学会 2011 年秋季大会	超高圧力下 RFe ₂ 合金の高密度水素吸収と逐次磁気転移	三井隆也, 増田亮, 平尾直久, 松岡岳洋
2011/9/26	口頭発表 31st International Conference on the Applications of the Mossbauer Effect (ICAME2011)	Energy Domain Synchrotron Radiation ⁵⁷ Fe-Mossbauer Spectroscopy using Nuclear Bragg Monochromator and its Applications	T.Mitsui, R. Masuda, N. Hirao, K. Mibu, M. Seto
2011/9/26	口頭発表 31st International Conference on the Applications of the Mossbauer Effect (ICAME2011)	An in-situ Mossbauer study using synchrotron radiation	R. Masuda, T. Mitsui, K. Itoh, K. Sakaki, H. Enoki, Y. Nakamura, M. Seto
2011/9/25	ポスター発表 AIRAPT-23; International Conf. of High Pressure Sci. and Technol. (Mumbai, India)	High Pressure Raman and Visible Absorption Study on Rare-Earth Trihydrides with FCC Structure	T. Kume, T. Nakamoto, N. Shimura, S. Sasaki, H. Shimizu, A. Machida, T. Watanuki, K. Aoki, K. Takemura

2011/9/27	口頭発表（招待講演） International Conferences on High Pressure Science and Technology (AIRAPT-23)	X-ray and Neutron Diffraction Studies of Pressure-induced Phase Separation of LaD ₂	A. Machida, M. Honda, T. Hattori, A. Sano-Furukawa , T. Watanuki, Y. Katayama, K. Aoki, K. Komatsu, H. Arima, H. Ohshita, T. Otomo, M. Tsubota, T. Ichikawa, Y. Kojima, D.Y. Kim
2011/10/4	ポスター発表 11th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures	Simultaneous measurements of D ₂ thermal desorption and surface photoemission on oxidized V(001) surface	Y. Teraoka, M. Tode, J. Harries, A. Yoshigoe
2011/10/24	口頭発表 Low Carbon Earth Summit 2011 (LCES-2011)	Hydrogenation of Aluminum at High Pressures and Temperatures	齋藤 寛之, 町田 晃彦, 片山 芳則, 青木 勝敏
2011/11/1	ポスター発表 SPring-8 コンファレンス 2011	放射光メスbauer分光に よる水素関連材料研究	三井 隆也, 瀬 戸 誠
2011/11/7	ポスター発表 日本金属学会 2011 年秋期 (第 149 回) 大会	重水素化 V(001)酸化表面の 熱変性と D ₂ 昇温脱離温度と の相関	戸出真由美, J. R. Harries, 寺岡有 殿, 吉越章隆
2011/11/8	口頭発表 日本金属学会 2011 年秋期 (第 149 回)大会	アルミニウム金属中への水 素の固溶	齋藤寛之, 町田 晃彦, 片山芳則, 青木勝敏
2011/11/9	口頭発表 日本金属学会 2011 年秋期 (第 149 回)大会	放射光その場 X 線回折測定 による TiH ₂ の高温高压状態 図の決定	遠藤成輝, 齋藤 寛之, 町田晃彦, 片山芳則, 青木

			勝敏
2011/11/9	口頭発表 日本金属学会 2011 年秋期 (第 149 回)大会	LaNi _{4.5} Al _{0.5} 合金の水素吸蔵反 応過程における時分割 X 線 回折測定	樋口健介, 町田 晃彦, 片山芳則, 榊浩司 Hyunjeong Kim, 中村優美子
2011/11/9	口頭発表 日本金属学会 2011 年秋期 (第 149 回)大会	アルカリ金属アミド・アルカ リ土類金属アミドの電子状 態	鎌倉望, 竹田幸 治, 山上浩志, 宮 岡裕樹, 坪田雅 己, 市川貴之, 小 島由継, 室隆桂 之, 木下豊彦
2011/11/9	口頭発表 日本金属学会 2011 年秋期 (第 149 回)大会	Searching for the Structural Origin of the Excellent/poor Cyclic Properties of V-based bcc Alloys	Kim Hyunjeong, 榊 浩司, 中村 優美子, 中村 仁, 秋葉悦男, 町田晃彦, 綿貫 徹, 青木正和, 則竹達夫, T. Proffen
2011/11/9	口頭発表 第 52 回高圧討論会	高圧下におけるランタン 2 水 素化物の構造相転移	本田充紀, 町田 晃彦, 服部高典, 佐野亜沙美, 綿 貫徹, 片山芳則, 青木勝敏, 有馬 寛, 小松一 生, 大下英敏, 大 友季哉, 藤久裕 司
2011/11/9	口頭発表 第 52 回高圧討論会	高圧力下における LaD ₂ の相 分離と 1 重水素化物の形成	町田晃彦, 本田 充紀, 服部高典, 佐野亜沙美, 綿 貫徹, 片山芳則, 青木勝敏, 有馬 寛, 小松一生, 大 下英敏, 大友季 哉, D. Y. Kim

2011/11/9	口頭発表 第 52 回高圧討論会, 沖縄	立方晶系希土類三水素化物 の高圧ラマン散乱及び紫外 可視吸収分光	中本琢磨, 志村 直哉, 熊崎洋平, 久米徹二, 佐々 木重雄, 清水宏 晏, 青木勝敏, 綿 貫徹, 町田晃彦
2011/11/9	口頭発表 第 52 回高圧討論会 (沖 縄)	高水素圧力の印加が誘起す る EuH_x の結晶構造と価数 の変化	松岡岳洋, 清水 克哉, 藤久裕司, 平尾直久, 大石 泰生, 依田芳卓, 三井隆也, 増田 亮, 町田晃彦, 青 木勝敏, 瀬戸誠
2011/11/9	口頭発表 第 52 回高圧討論会 (沖 縄)	鉄水素化物の高圧力下での 結晶構造と物性	大石泰生, 平尾 直久, 松岡岳洋, 清水克哉, 三井 隆也, 町田晃彦, 青木勝敏
2011/11/10	口頭発表 第 52 回高圧討論会	角度分散 X 線回折によるア ルミニウム水素化反応のそ の場観察	齋藤寛之, 町田 晃彦, 片山芳則, 青木勝敏
2011/11/10	口頭発表 第 52 回高圧討論会	TiH_2 の高温高圧相関係	遠藤成輝, 齋藤 寛之, 町田晃彦, 片山芳則, 青木 勝敏
2011/11/11	口頭発表 第 52 回高圧討論会	液体遷移金属水素合金の構 造 II	片山芳則, 齋藤 寛之, 青木勝敏
2011/11/16	ポスター発表 第 52 回真空に関する連合 講演会	V(001)表面酸化膜の熱変性過 程の光電子分光観察と重水 素脱離の同時測定	戸出真由美, J. R. Harries, 寺岡有 殿, 吉越章隆
2011/11/23	口頭発表 1st Asia-Oceania Conference on Neutron Scattering (1st AOCNS)	Pressure-Induced Phase Separation with Intersite Hydrogen Transfer in Rare-earth Metal Hydrides	K. Aoki, A. Machida, M. Honda, T. Hattori, A. Sano-Furukawa , T. Watanuki,

			Y. Katayama, K. Komatsu, H. Arima, H. Ohshita, T. Otomo, M. Tsubota, K. Doi, T. Ichikawa, Y. Kojima, D.Y. Kim
2011/12/14	ポスター発表 6th International Symposium on Surface Science -Towards Nano-, Bio-, and Green Innovation -	A chemical-state specific study of the composition of the natural oxide layer of $V_{25}Cr_{40}Ti_{35}$	J. R. Harries, Y. Teraoka, M. Tode, A. Yoshigoe
2011/12/15	ポスター発表 第31回表面科学学術講演 会	A chemical-state specific study of the composition of the natural oxide layer of $V_{25}Cr_{40}Ti_{35}$	J. Harries, 寺岡 有殿, 戸出真由 美, 吉越章隆
2012/1 (発表 予定)	口頭発表 地球惑星科学研究会・高 圧物質科学研究会 合同 研究会合	アルミニウム水素化反応の 放射光その場観察	齋藤寛之, 町田 晃彦, 片山芳則, 青木勝敏
2012/1/8 (発 表予定)	口頭発表 第25回日本放射光学会年 会・放射光科学合同シン ポジウム	アルミニウム水素化物の軟 X 線発光・吸収分光-金属と水素 の結合様式の実験的解明	竹田幸治
2012/1/8 (発 表予定)	口頭発表 第25回日本放射光学会年 会・放射光科学合同シン ポジウム	ナノ金属粒子の時分割 XAFS-水素化反応の律速要因 の解析	松村大樹
2012/1/8 (発 表予定)	口頭発表 第25回日本放射光学会年 会・放射光科学合同シン ポジウム	金属単結晶の表面 X 線回折- 水素吸収のチャンネル形成 の推測	高橋正光
2012/1/9 (発 表)	ポスター発表	多素子 SSD を用いたエネル	片山芳則, 齋藤

表予定)	第25回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム	ギー分散型 X 線回折測定 II	寛之, 金子洋
------	-----------------------------	------------------	---------

(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
2011/6/14	ポスター発表 International Space Conference on Protection of Materials and Structures from Space Environment	Hydrogen removal from hydrogenated diamond-like carbon films by photon and energetic atomic oxygen beam exposures	K. Yokota, M. Tagawa, K. Matsumoto, Y. Furuyama, A. Kitamura, K. Kanda, M. Tode, A. Yoshigoe, Y. Teraoka

(材料物性 G:神戸大学)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2011/6/14	ポスター発表 International Space Conference on Protection of Materials and Structures from Space Environment	Hydrogen removal from hydrogenated diamond-like carbon films by photon and energetic atomic oxygen beam exposures	K. Yokota, M. Tagawa, K. Matsumoto, Y. Furuyama, A. Kitamura, K. Kanda, M. Tode, A. Yoshigoe, Y. Teraoka
2011/8/30	口頭発表 第72回応用物理学会 学術講演会	原子状酸素照射時における Si 添加高水素 DLC 膜からの揮発性反応生成物脱離	田川雅人, 横田久美子, 岸田和博, 古山雄一, 戸出真由美, 吉越章隆, 寺岡有殿, T. K. Minton

(材料物性 G:大阪大学)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2011/8/24	口頭発表	Structural, magnetic and electrical	N. Hirao,

	XXII Congress and General Assembly of the IUCr (IUCr 2011) (Madrid, Spain)	properties of iron-hydride	Y. Ohishi, T. Matsuoka, T. Mitsui, K. Takemura, K. Shimizu, A. Machida, K. Aoki
2011/9/21	口頭発表 日本物理学会 2011 年 秋季大会	In pursuit of pressure-induced metallic and superconductive phase in YH ₃	Zhenhua Chi, Huyen Nguyen, Takahiro Matsuoka, Tomoko Kagayama, Katsuya Shimizu
2011/11/9	口頭発表 第 52 回高圧討論会	Cryogenic implementation of charging diamond anvil cell with H ₂ and D ₂	Zhenhua Chi, Huyen Nguyen, Takahiro Matsuoka, Tomoko Kagayama, Naohisa Hirao, Yasuo Ohishi, Katsuya Shimizu

(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
2011/8/24	口頭発表 XXII Congress and General Assembly of the IUCr (IUCr 2011) (Madrid, Spain)	Structural, magnetic and electrical properties of iron-hydride	N. Hirao, Y. Ohishi, T. Matsuoka, T. Mitsui, K. Takemura, K. Shimizu, A. Machida, K. Aoki
2011/9/23	口頭発表 日本物理学会 2011 年秋季大会	超高圧力下 RFe ₂ 合金の高密度水素吸収と逐次磁気転移	三井隆也, 増田亮, 平尾直久, 松岡岳洋

2011/9/26	口頭発表 31st International Conference on the Applications of the Mossbauer Effect (ICAME2011)	Energy Domain Synchrotron Radiation ^{57}Fe -Mossbauer Spectroscopy using Nuclear Bragg Monochromator and its Applications	T.Mitsui, R. Masuda, N. Hirao, K. Mibu, M. Seto
2011/11/9	口頭発表 第 52 回高圧討論会 (沖縄)	高水素圧力の印加が誘起する EuHx の結晶構造と価数の変化	松岡岳洋, 清水 克哉, 藤久裕司, 平尾直久, 大石 泰生, 依田芳卓, 三井隆也, 増田 亮, 町田晃彦, 青 木勝敏, 瀬戸誠
2011/11/9	口頭発表 第 52 回高圧討論会 (沖縄)	鉄水素化物の高圧力下での結晶 構造と物性	大石泰生, 平尾 直久, 松岡岳洋, 清水克哉, 三井 隆也, 町田晃彦, 青木勝敏
2011/11/9	口頭発表 第 52 回高圧討論会	Cryogenic implementation of charging diamond anvil cell with H_2 and D_2	Zhenhua Chi, Huyen Nguyen, Takahiro Matsuoka, Tomoko Kagayama, Naohisa Hirao, Yasuo Ohishi, Katsuya Shimizu
2012/1/8 (発 表予定)	口頭発表 第 25 回日本放射光学 会年会・放射光科学合 同シンポジウム	鉄水素化物のメスバウワー分光- 金属格子の膨張による強磁性の 復活	平尾直久

(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
2010/9/25-30	ポスター発表 AIRAPT-23; International Conf. of	Magnetic states of Fe, Co, Ni hydrides probed by X-ray Magnetic Circular Dichroism (XMCD)	N. Ishimatsu, T. Shichijo, Y. Matsushima,

	High Pressure Sci. and Technol. (Mumbai, India)		H. Maruyama, N. Kawamura, M. Mizumaki, T. Matsuoka, K. Takemura
2012/1/8 (発表予定)	口頭発表 第25回日本放射光学 会年会・放射光科学合 同シンポジウム	金属水素化物の X 線磁気円二色性(XMCD)-電子状態から磁性の起源を解明する	石松直樹

(材料物性 G: 岐阜大学)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2011/9/25	ポスター発表 AIRAPT-23; International Conf. of High Pressure Sci. and Technol. (Mumbai, India)	High Pressure Raman and Visible Absorption Study on Rare-Earth Trihydrides with FCC Structure	T. Kume,, T. Nakamoto, N. Shimura, S. Sasaki, H. Shimizu, A. Machida, T. Watanuki, K. Aoki, K. Takemura
2011/11/9	口頭発表 第52回高圧討論会, 沖縄	立方晶系希土類三水素化物の高圧ラマン散乱及び紫外可視吸収分光	中本琢磨, 志村直哉, 熊崎洋平, 久米徹二, 佐々木重雄, 清水宏晏, 青木勝敏, 綿貫徹, 町田晃彦

(材料物性 G: 東北大学 大学院工学研究科(前川研))

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2011/6/7	招待講演 18 th International Conference on Solid State Ionics (Warsaw)	Lithium ion conduction in cation substituted LiBH ₄ -LiI composite electrolyte	H. Maekawa
2011/11/7	口頭発表 日本金属学会 2011年 秋期(第149回)大会	岩塩型構造を有する LiBH ₄ のリチウムイオン伝導特性	高村仁, 黒沼洋太, 尾元彰, 折茂慎一, 前川 英己

2011/11/7	ポスター発表 日本金属学会 2011 年 秋期 (第 149 回) 大会	蛍石型構造を有する Ca-Zr 系 水素化物の単相化とラマン 分光解析	畑山東, 前川英己, 高村仁
2011/11/7	口頭発表 日本金属学会 2011 年 秋期 (第 149 回) 大会	LiBH ₄ -LiI-RbI 系固体電解質 のリチウムイオン伝導とそ の機構	熊谷直樹, 菅野公 貴, 宮崎怜雄奈高 村仁, 前川英己, 松 尾元彰, 折茂慎一
2011/11/9	口頭発表 日本金属学会 2011 年 秋期 (第 149 回) 大会	Study of hydrogenation/dehydrogenation kinetics of ZrCr ₂ by in-situ NMR	Jamil Ahmad, 前川英 己, 高村仁

(材料物性 G: 東北大学 大学院工学研究科(亀川研))

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2011/4/26	ポスター発表 2011 MRS Spring Meeting	Crystal Structure and Hydrogen Storage Properties of novel Mg-Zr-(Li, Na, K) Hydrides Prepared by Gigapascal Hydrogen Pressure Method	N.Takeichi, K. Shida, N. Kuriyama, T. Saka
2011/11/7	ポスター発表 日本金属学会 2011 年 秋期大会	超高压下で合成された Mg-Zr 系水素化物の結晶構造と水 素貯蔵特性	堀川高志, 竹市信彦, 志田賢二, 北村直之, 清林哲, 栗山信宏, 境哲男
2011/11/7	ポスター発表 日本金属学会 2011 年 秋期大会	超高压下で合成した Mg-Zr-K 水素化物の結晶構造と水素 貯蔵特性	竹市信彦, 堀川高志, 志田賢二, 北村直之, 清林哲, 栗山信宏, 境哲男
2011/11/8	口頭発表 日本金属学会 2011 年 秋期大会 (沖縄)	水素の有効機能と新規水素 化物(Mg・Li 系)・新規物質 の超高压合成	岡田益男
2011/11/8	ポスター発表 日本金属学会 2011 年 秋期大会 (沖縄)	超高压法による Sn-TM 系新 規化合物の合成(TM=3d 遷 移金属)	柴田章兵, 栗岩貴寛, 亀川厚則, 岡田益男
2011/11/9	口頭発表 日本金属学会 2011 年 秋期大会 (沖縄)	超高压法による新規金属間 化合物 Mg _{1.1} Pd _{0.9} の合成	川上真世, 高荷直樹, 栗岩貴寛, 亀川厚則, 岡田益男

(計算科学G：産業技術総合研究所)

発表年月日	大会名等	タイトル	発表者
2011.4.26	MRS 2011 spring meeting (San Francisco) ポスター発表	Theoretical Study of Hydrogen Adsorption and Diffusion on Palladium Icosahedral Clusters	Phung T.V. Bac, H. Ogawa
2011.4.26	MRS 2011 spring meeting (San Francisco) ポスター発表	Classical MD simulation of hydrogen absorption in f.c.c. and b.c.c. nanoparticles	H. Ogawa, Phung T.V. Bac
2011.4.26	MRS 2011 spring meeting (San Francisco) ポスター発表	A molecular dynamics study of hydrogen diffusion in aluminum dislocations	K. Nishimura
2011.5.13	第 14 回理論化学討論会 ポスター発表	経路積分法を用いた炭素系水素貯蔵材料の研究	鈴木机倫 立川仁典 小川浩 西原洋知 京谷隆 長嶋雲兵
2011.7.19	Gordon research conference: Hydrogen-metal systems (Easton, MA, USA) ポスター発表	Theoretical Study of Hydrogen Chemisorption on Curved Surfaces in Zeolite-Templated Carbon (ZTC)	H. Ogawa, M. Kayanuma, K. Suzuki, U. Nagashima, H. Nishihara, T. Kyotani
2011.7.22	World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC) 2011 ポスター発表	Temperature dependence of the hydrogen adsorption sites on Zeolite-templated Carbon	K. Suzuki, M. Tachikawa, H. Ogawa, H. Nishihara, T. Kyotani, U. Nagashima
2011.9.21	第 5 回分子科学討論会 (札幌) ポスター発表	経路積分法を用いた炭素系水素貯蔵材料の研究	鈴木机倫 立川仁典 小川浩 西原洋知 京谷隆 長嶋雲兵
2011.10.8	日本機械学会第 24 回計算力学講演会 (岡山) ポスター発表	アルミニウム中の水素拡散に関する分子動力学シミュレーション	西村憲治

2011.11.9	日本金属学会 2011 年秋期 大会（沖縄） 口頭発表	V-Mo 系 bct 合金中の水素の吸 蔵サイト依存性に関する理論 計算	小川 浩 Phung T.V.Bac
-----------	-----------------------------------	--	-----------------------

（計算科学 G：東北大学金属材料研究所）

発表年月日	大会名等	タイトル	発表者
平成 23 年 4 月 1 日	ナノ学会会報	大規模シミュレーション計 算による材料科学	佐原亮二、水関博志、 川添良幸
平成 23 年 6 月 13 日	TechConnect World 2011 (Clean Technology) Conference & Expo 2011	Theoretical Modeling of Phase Diagram of Clathrate Hydrates toward Hydrogen Storage Applications	R. V. Belosludov, H. Mizuseki, O. S. Subbotin, V. R. Belosludov, and Y. Kawazoe
平成 23 年 7 月 17 日	The 7th International Conference on Gas Hydrates	Structural Transformations sI-sII Hydrogen-Methane and Hydrogen-Ethane Clathrate Hydrates	O. S. Subbotin, R. K. Zhdanov, V. R. Belosludov, R. V. Belosludov, H. Mizuseki, and Y. Kawazoe
平成 23 年 7 月 17 日	The 7th International Conference on Gas Hydrates	Theoretical Aspects of Hydrogen Storage in Clathrate Hydrates: Lattice Dynamics and First-principles Calculations	R. V. Belosludov, H. Mizuseki, Y. Kawazoe, O. S. Subbotin, and V. R. Belosludov
平成 23 年 11 月 1 日	Handbook on Fullerene, Synthesis, Properties and Applications	Functionalized Nanofullerenes for Hydrogen Storage: A Theoretical Perspective	N. S. Venkataramanan, A. Suvitha, H. Mizuseki, and Y. Kawazoe
平成 23 年 4 月 21 日	日本学術振興会合金 状態図第 172 委員会 第 21 回委員会研究会 （口頭発表）	全電子混合基底法プログラム TOMBO の開発とその応用	佐原亮二、水関博志、 Marcel Sluiter, 大野かお る、川添良幸
平成 23 年 4 月 28 日	MRS Spring 2011 （口頭発表）	First-Principles Calculations on Hydrogen Storage Capacity	H. Mizuseki, N. S. Venkataramanan, R. Sahara, and Y. Kawazoe
平成 23 年 6 月 2 日	ナノ学会第 9 回大会 （口頭発表）	第一原理計算によるアルカリ 金属をドーピングした新規水素貯 蔵材料の評価	水関博志、N. S. Venkataramanan、陳 剛、 佐原亮二、川添良幸
平成 23 年 6 月 14 日	TechConnect World 2011 (Clean	Theoretical Modeling of Phase Diagram of Clathrate Hydrates	R. V. Belosludov, H. Mizuseki, O. S. Subbotin,

	Technology) Conference & Expo 2011 (口頭発表)	toward Hydrogen Storage Applications	V. R. Belosludov, and Y. Kawazoe
平成 23 年 9 月 7 日	The 6th Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-6) (招待講演)	First Principles Investigation on Potential Hydrogen Storage Materials	H. Mizuseki and Y. Kawazoe
平成 23 年 9 月 9 日	The 6th Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-6) (口頭発表)	Theoretical Study of Hydrogen Storage Materials using All-electron Mixed-basis Program TOMBO	R. Sahara, H. Mizuseki, M. H. F. Sluiter, K. Ohno, and Y. Kawazoe
平成 23 年 11 月 8 日	日本金属学会 2011 年秋期大会 (口頭発表)	新規水素貯蔵材料のシミュレ ーション探索研究	水関博志、N. S. Venkataramanan、R. V. Belosludov、佐原亮二、 陳剛、M. Khazaei、川添 良幸
平成 23 年 4 月 26 日	MRS Spring 2011 (ポス ター発表)	Novel Hydrogen Storage Materials: An Atomic Scale Computational Approach	H. Mizuseki, N. S. Venkataramanan, R. Sahara, G. Chen, M. Khazaei, and Y. Kawazoe
平成 23 年 4 月 26 日	MRS Spring 2011 (ポス ター発表)	Theoretical Study of Hydrogen Storage Materials Using All-electron Mixed-basis Program TOMBO	R. Sahara, H. Mizuseki, M. H. F. Sluiter, K. Ohno and Y. Kawazoe
平成 23 年 6 月 2 日	ナノ学会第 9 回大会 (ポスター発表)	全電子混合基底法プログラム TOMBO の開発と水素貯蔵材 料への応用	佐原亮二、水関博志、 Marcel Sluiter、大野かお る、川添良幸
平成 23 年 7 月 18 日	The 7th International Conference on Gas Hydrates (ポスター発 表)	Structural Transformations sI-sII Hydrogen-Methane and Hydrogen-Ethane Clathrate Hydrates	O. S. Subbotin, R. K. Zhdanov, V. R. Belosludov, R. V. Belosludov, H. Mizuseki, and Y. Kawazoe
平成 23 年 7	The 7th International	Theoretical Aspects of	R. V. Belosludov, H.

月 18 日	Conference on Gas Hydrates (ポスター発表)	Hydrogen Storage in Clathrate Hydrates: Lattice Dynamics and First-principles Calculations	Mizuseki, Y. Kawazoe, O. S. Subbotin, and V. R. Belosludov
--------	-------------------------------------	--	--

(計算科学G : 広島大学)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2011/04/26	Materials Research Society Spring Meeting San-Francisco (USA) ポスター発表	First-Principles Study of Cobalt Hydrides	Y. Matsuura, T. Shishidou, T. Oguchi
2011/04/26	Materials Research Society Spring Meeting San-Francisco (USA) ポスター発表	<i>ab initio</i> Calculations on MH+NH ₃ Hydrogen Storage System	A. Yamane, F. Shimojo, K. Hoshino, T. Ichikawa, Y. Kojima
2011/04/28	Materials Research Society Spring Meeting San-Francisco (USA) 口頭発表	First-Principles Study of Nickel Hydrides	T. Shishidou, Y. Matsuura, T. Oguchi
2011/05/23-26	1 st Asian Symposium on Hydrogen Storage Materials (AHSM 2011), May 23-26, 2011, Thousand-island Lake, Hangzhou (China) ポスター発表	H ₂ desorption from MH+NH ₃ system: <i>ab initio</i> calculation	A. Yamane, F. Shimojo, K. Hoshino, T. Ichikawa, Y. Kojima
2011/08/29	第 5 回水素若手研究会 ソウル市 (韓国) ポスター発表	<i>ab initio</i> Simulation on Li-N-H system with catalyst	A. Yamane, F. Shimojo, K. Hoshino, T. Ichikawa, Y. Kojima
2011/09/21	日本物理学会 2011 年秋季大会 (富山) 口頭発表	第一原理計算によるアルカリ金属水素化物・アンモニア系からの水素放出と電子状態	山根阿樹、下條冬樹、星野公三、市川貴之、小島由継
2011/11/09	日本金属学会 2011 年秋期大会 (沖縄) 口頭発表	第一原理計算による LiH・NH ₃ 系への触媒の影響	山根阿樹、下條冬樹、星野公三、市川貴之、小島由継
2011/12/05	第 25 回 分子シミュレーション討論会 (東京) 口頭発表	第一原理分子動力学法による Li-N-H 水素貯蔵系に対する TiCl ₃ の触媒作用の研究	山根阿樹、下條冬樹、星野公三、市川貴之、小島由継
2012/01/30	Workshop on Physics in Materials Osaka 口頭発表	First-Principles Study of Nickel Hydrides	T. Shishidou, Y. Matsuura, T. Oguchi

2012/01/30	Workshop on Physics in Materials Osaka 口頭発表	<i>ab initio</i> study on Li-N-H hydrogen storage system	A. Yamane, F. Shimojo, K. Hoshino, T. Ichikawa, Y. Kojima
2012/01/30	Workshop on Physics in Materials Osaka 口頭発表	First-principles study on Ti compounds used as catalysts in lithium amide/imide reactions	T. Tsumuraya, T. Shishidou, T. Oguchi

(計算科学 G : 東北大学多元物質科学研究所)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2011/7/26	Carbon2011 ポスター発表	Study of H ₂ Spillover Phenomenon on Pt-loaded Porous Carbons	S. Ittisanronnachai H. Nishihara M. Ito M. Uchiyama T. Kyotani
2011/7/28	Carbon2011 講演	Reversible Size Control of Carbon Nanopores by Mechanical Force	H. Nishihara K. Yamamoto M. Ito M. Uchiyama H. Tanaka A. Maki M. Miyahara T. Kyotani
2011/11/29	第38回 炭素材料学会 年会 講演	ゼオライト鋳型炭素の細孔径可逆制御に伴う分子吸着量の変化	山本健太郎、西原洋知、S. Ittisanronnachai、伊藤仁、内山誠、京谷隆
2011/11/30	第38回 炭素材料学会 年会 講演	白金錯体担持炭素の水素吸蔵特性	糸井弘行、西原洋知、石井孝文、S. Ittisanronnachai、伊藤仁、松村大樹、京谷隆
2011/11/30	第38回 炭素材料学会 年会 講演	白金担持ゼオライト鋳型炭素の高圧水素吸蔵特性	伊藤仁、内山誠、糸井弘行、S. Ittisanronnachai、西原洋知、京谷隆

(計算科学 G : 大阪大学)

発表日	大会名等	タイトル	発表者
2011/05/25	1 st Asian Symposium on Hydrogen Storage Materials Hangzhou (China) 口頭発表	Ammonia-Borane and Amidoborides for Hydrogen Storage: A First-Principles Study	H. B. Huang, T. Tsumuraya, T. Shishidou, T. Oguchi
2011/11/29	Materials Research Society	Ammonia Borane and	H. B. Huang,

	Fall Meeting Boston (USA) ポスター発表	Amidoboranes for Hydrogen-Storage Materials: A Dispersion Corrected Density-Functional Theory Approach	K. Yamauchi, I. Hamada, T. Oguchi
2012/01/31	Workshop on Physics in Materials Osaka 口頭発表	A First Principles Study of Ammonia Borane and Amidoboranes	H. B. Huang, K. Yamauchi, I. Hamada, T. Oguchi

(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
2011/7/17-7/21	口頭発表 5th EUROPEAN CONFERENCE ON NEUTRON SCATTERING	Neutron Total Scattering Instrument (NOVA) for Structural Studies of Hydrogen Storage Materials	大友季哉
2011/7/21	ポスター発表 Gordon Research Conference	Structure Analysis of Aluminum Hydride by High Intensity Neutron Total Diffractometer (NOVA)	池田一貴、大友季哉、 大下英敏、金子直勝、 坪田雅己、瀬谷智洋、 鈴谷賢太郎、武藤俊介、 千星聡、折茂慎一
2011/7/28	口頭発表 先端エレクトロニクス DAQ セミナー	データ収集システムの 実際	大下英敏
2011/8/2	口頭発表 Thermec'2011 International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials	Synthesis, properties and applications of aluminum hydride	池田一貴、武藤俊介、 大友季哉、折茂慎一
2011/8/22	口頭発表 第9回水素量子ア トミクス研究会	高強度中性子全散乱装 置 (NOVA) によるアル ミニウム水素化物の構 造 解析と水素放出特性	池田一貴、大友季哉、 武藤俊介、折茂慎一
2011/10/4	ポスター発表 NEDO 成果報告シ ンポジウム	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	
2011/10/22	口頭発表 日本物理学会	中性子散乱法の革新と 水素が創る構造とダイ ナミクスの研究	大友季哉
2011/10/12~10/14	ポスター発表 Analysis of Diffraction Data in Real Space,	Current status of high intensity neutron total diffractometer at J-PARC	大下英敏、大友季哉、 池田一貴、金子直勝、 坪田雅己、瀬谷智洋、 鈴谷賢太郎

	Grenoble 2011 (Add2011)		
2011/10/23	ポスター発表 IEEE Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference (IEEE NSS & MIC 2011)	Stability of a Neutron Beam Monitor for NOVA at J-PARC	大下英敏、庄子正剛、 大友季哉、池田一貴、 内田智久、宇野彰二、金 子直勝、小池貴久、鈴 谷賢太郎、瀬谷智洋、 坪田雅己
2011/10/24 (会期: 2011/10/19~10/26)	口頭発表 Low Carbon Earth Summit-2011 (LCES-2011)	Thermodynamics and Structural Study by Neutron for LiAl(ND ₂) ₄	坪田雅己、小野泰輔、 山中俊幸、下田景士、 市川貴之、小島由継、 大友季哉、大下英敏、 池田一貴、金子直勝、 瀬谷智洋、鈴谷賢太郎
2011/11/7	口頭発表 日本金属学会 2011 年秋期講演大会	高強度中性子全散乱装 置 NOVA による水素貯 蔵材料の構造研究	池田一貴、大友季哉、 大下英敏、金子直勝、 坪田雅己、瀬谷智洋、 鈴谷賢太郎、折茂慎一
2011/11/23	ポスター発表 1-st Asia-Oceania Conference on Neutron Scattering (1st AOCNS)	Current Status of High Intensity Diffractometer (NOVA) at MLF, J-PARC	大友季哉、大下英敏、 池田一貴、金子直勝、 鈴谷賢太郎、 瀬谷智洋、坪田雅己
2011/11/23	ポスター発表 1-st Asia-Oceania Conference on Neutron Scattering (1st AOCNS)	Structure Analysis of Aluminum Hydride by High Intensity Neutron Total Diffractometer (NOVA)	池田一貴、大友季哉、 大下英敏、金子直勝、 坪田雅己、瀬谷智洋、 鈴谷賢太郎、武藤俊介、 千星聡、折茂慎一
2011/11/23	ポスター発表 1-st Asia-Oceania Conference on Neutron Scattering (1st AOCNS)	Data analysis for High Intensity Total Diffractometer at J-PARC	大下英敏、大友季哉、 池田一貴、金子直勝、 鈴谷賢太郎、 瀬谷智洋、坪田雅己
2011/11/21-11/23	ブース展示 1-st Asia-Oceania Conference on Neutron Scattering (1st AOCNS)	Advanced Fundamental Research on Hydrogen Storage Materials	
2012/1/20	口頭発表 (予定) 第3回 MLF シンポ ジウム	高強度全散乱装置 (NOVA) による水素貯 蔵材料の構造	池田一貴、大友季哉、 大下英敏、金子直勝、 坪田雅己、瀬谷智洋、 鈴谷賢太郎、折茂慎一
2012/1/19~1/20	ポスター発表 (予 定) 第3回 MLF シンポ ジウム	J-PARC 高強度中性子全 散乱装置 (NOVA)におけ るデータ解析	大下英敏、大友季哉、池 田一貴、金子直勝、鈴 谷賢太郎、瀬谷智洋、 坪田雅己
2012/1/19~1/20	ポスター発表 (予 定)	高強度全散乱装置	坪田雅己、大友季哉、

	定) 第3回 MLF シンポ ジウム	NOVA を用いたリチウ ムアルミアミドの構造 解析	大下英敏、金子直勝、 池田一貴、瀬谷智洋、 鈴谷賢太郎、小野泰輔、 市川貴之、小島由継
--	--------------------------	----------------------------------	--

プレスリリース【全6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、化学工業日報、電気新聞 (2008年10月21日) 日刊工業新聞 (2008年10月24日) 化学新聞 (2008年10月31日) 燃料電池新聞 (2008年11月15日)
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)

平成23年度【2件】

タイトル	関連委託先	報道メディア等

<p>希土類金属水素化物の結晶構造の一般則を確立 - 水素吸蔵材料の設計指針に重要な知見を提供</p>	<p>高輝度光科学研究センター、日本原子力研究開発機構、大阪大学</p>	<p>日刊工業新聞、日経 NET (オンライン版) (2011 年 7 月)</p>
<p>「水素を大量に貯蔵したアルミニウムの結合様式を放射光で解明 - アルミニウム水素化物の水素貯蔵性能を改良するための指針を提供 -」</p>	<p>日本原子力研究開発機構</p>	<p>電気新聞 (2011 年 10 月 21 日)、化学工業日報 (2011 年 10 月 24 日)、日刊工業新聞</p>

受賞等【全28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」	2008/2/14

平成20年度【6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」	2009/2/16
宮崎怜雄奈 唐橋大樹 熊谷直己 野田泰斗 安東真理子 高村仁 松尾元彰 折茂慎一 前川英己	Best Poster Award The 17 th International Conference on Solid State Ionics, Toronto, Canada	2008/6/30
前川英己	(財)科学計測振興会 「科学計測振興会賞」 「NMR(核磁気共鳴)装置の開発と実用材料への応用研究」	2008/12/11
前川英己	(社)日本金属学会 功績賞 「材料化学部門」	2009/3/25
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【7件】

受賞者	賞等の名称	受賞日
山本ひかる	日本金属学会 2009秋期大会 「優秀ポスター賞」	2009/9/15-17

日野聡 宮岡裕樹 坪田雅己 市川貴之 小島由継	研究題目：「アルカリ金属水素化物-アンモニア系水素吸蔵/放出特性」	
小野泰輔 坪田雅己 下田景士 市川貴之 小島由継 小島健一	日本金属学会 2009秋期大会「優秀ポスター賞」 研究題目：「 $M(\text{Al}(\text{NH}_2)_4)_x$ ($M=\text{Li}, \text{Na}, \text{K}, \text{Mg}, \text{Ca}$) のガス放出特性及び構造評価」	2009/9/15-17
齋藤 寛之	日本高圧力学会奨励賞	2009/7/29
高村仁	(社)日本金属学会 功績賞「材料化学部門」	2010/3/28
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）	2010/3/28
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
Khazaei Mohammad	ナノ学会第7回大会若手優秀発表賞	2009/5/10

平成22年度【10件】

受賞者	賞等の名称	受賞日
秋葉悦男	IPHE Technical Achievement Award, The International Partnership for Hydrogen and Fuel Cells in the Economy (IPHE)	2010/5/17
小野 晃史 礒部 繁人 王 永明 橋本 直幸 大貫 惣明	金属学会 「論文賞」若手部門 研究題目：「電子顕微鏡その場観察による Mg 系水素貯蔵材料の反応メカニズムの検討」	2010/9/25
李 忠賢 礒部 繁人 王 永明 橋本 直幸 大貫 惣明 Yu Zhang 市川 貴之	金属学会北海道支部 「優秀ポスター賞」 研究題目：「水素貯蔵材料 AB-MH($M=\text{Li}, \text{Na}$)複合物質の微細構造」	2010/7/29

小島 由継		
森田襟 馬涛 磯部繁人 王永明 橋本直幸 大貫惣明 木村通 市川貴之 小島由継	金属学会北海道支部 「奨励賞」 研究題目：「触媒添加した水素化マグネシウムの反応速度と触媒表面の化学結合状態の関係」	2011/1/28
H. Yao S. Isobe Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki	International Symposium on Advanced Energy Systems and Materials, Busan, KOREA, “Award” “Study on Decomposition Process of Sodium Alanate by Means of Transmission Electron Microscope”	2011/3/5
A. Umeda T. Wakasugi S. Isobe Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki	International Symposium on Advanced Energy Systems and Materials, Busan, KOREA, “Award” “In-situ TEM observation of hydrogenation reaction in Mg catalyzed with Nb ₂ O ₅ ”	2011/3/5
宮崎玲雄奈 熊谷直己 菅野公貴 松尾元彰 高村仁 折茂慎一 前川英己	Best Poster Award 12 th Asian Conference on Solid State Ionics, Wuhan	2010/5/6
西原 洋知	炭素材料学会 研究奨励賞(2010)「ナノカーボンの合成とエネルギー貯蔵への応用に関する研究」	2010/12/2
小野寺秀博	第 50 回谷川・ハリス賞受賞 「合金の組織と特性に関する研究」	2011/3/25
三沢正勝	平成 22 年度 日本中性子科学会 功績賞 「パルス中性子を用いた液体・非晶体の構造測定技術や解析法の開発と分子性液体の構造研究」	2010/12/9

平成 23 年度 【4 件】

受賞者	賞等の名称	受賞日
-----	-------	-----

T. Zhang S. Isobe Y. Wang N. Hashimoto S. Ohnuki	ASIAN-CORE SUMMER SCHOOL ON HYDROGEN 2011 IN SNU (6th Symposium on Hydrogen for Young Scientists) “TEM investigation of de/hydrogenation reaction in Li-N-H materials”	2011/8/29-30
栗岩貴寛 亀川厚則 岡田益男	文部科学大臣表彰(2011) 平成 23 年度科学技術分野 (研究部門) 表彰業績:「材料における水素利用技術に 関する研究」	2011/4/11
岡田益男	日本金属学会 (2011) 平成 23 年度村上記念賞「水素の 有効機能と新規水素化物・新規物質の超高压合成」	2011/11/9
糸井 弘行	第 6 回多元物質科学研究奨励賞「白金クラスターを 利用した水素吸蔵材料の開発」	2011/12/8

その他【全 30 件】 平成 19 年度【5 件】

タイトル	関連委託先	備考
当該事業を紹介するパンフレットの作成と配布(平成 20 年 2 月)	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作成・公開	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/
ニュースレターの発行(第 1 号、平成 20 年 3 月)	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
水素誘起非晶質化のアニメーション作成・公開	物質・材料研究機構	FC-EXPO、プロジェクトホームページにて公開準備中
水素貯蔵シミュレータの作成・公開	物質・材料研究機構	FC-EXPO、プロジェクトホームページにて公開準備中

平成 20 年度【11 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)	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)	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)(第 3 号、平成 21 年 3 月)	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	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

temperature」		
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
ソフトウェア「第一原理計算解析システム」	産業技術総合研究所計算科学研究部門	Linux 版、解析機能追加
ソフトウェア「格子欠陥ビルダー」	産業技術総合研究所計算科学研究部門	Java/Java-3D 版、未公開
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21年度【8件】

タイトル	関連委託先	備考
ニュースレターの発行 (第4号、平成21年11月)	産業技術総合研究所 エネルギー技術研究部門	PL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	http://unit.aist.go.jp/energy/hydro-star/
FC EXPO2010 の NEDO ブースで成果発表	広島大学 先進機能物質研究センター	その場光学顕微鏡観察の動画紹介
ロスアラモス国立研究所と広島大学先進機能物質研究センターの間で部局間協定を締結	広島大学 先進機能物質研究センター	プレス発表 中国新聞、以下オンライン記事：時事通信、中国新聞
ソフトウェア「第一原理計算解析システム」	産業技術総合研究所 計算科学研究部門	Linux 版、解析機能追加
計算科学Gホームページからの成果の発信	産業技術総合研究所 計算科学研究部門	
イベント展示「水素貯蔵材料の計算機シミュレーション」	東北大学 金属材料研究所	第6回国際水素・燃料電池展 (FC Expo 2010) , 2010.3.3-5, 東京
イベント展示「中性子回折による水素貯蔵材料の構造解析装置」	高エネルギー加速器研究機構	第6回国際水素・燃料電池展 (FC Expo 2010) , 2010.3.3-5, 東京

平成22年度【4件】

タイトル	関連委託先	備考
ニュースレターの発行（第5号、平成22年7月）	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/
計算科学Gホームページからの成果の発信	産業技術総合研究所 ナノシステム研究部門	
イベント展示「水素貯蔵材料の計算機シミュレーション」（平成22年11月13-19日）	東北大学 金属材料研究所	Supercomputing'10 (SC10),米国ニューオーリンズ市

平成23年度【2件】

タイトル	関連委託先	備考
ニュースレターの発行（第6号、平成23年12月）	高エネルギー加速器研究機構	P L業務の一環
事業のウェブページの更新	高エネルギー加速器研究機構	P L業務の一環 http://hydro-star.kek.jp/