

研究評価委員会  
「水素貯蔵材料先端基盤研究事業」(事後評価)分科会  
議事要旨

日 時：平成 24 年 7 月 30 日 (月) 10:00～18:00

場 所：WTC コンファレンスセンター Room A

出席者(敬称略、順不同)

<分科会委員>

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

<推進者>

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

<実施者>

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

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

<企画調整>

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

<事務局>

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

一般傍聴者 5名

## 議事次第

### <公開の部>

1. 開会、分科会の設置、資料の確認
2. 分科会の公開について
3. 評価の実施方法
4. 評価報告書の構成について
5. プロジェクトの概要説明
  - (1) 事業の位置付け・必要性
  - (2) 研究開発マネジメント
  - (3) 研究開発成果
  - (4) 実用化の見通し
6. プロジェクトの詳細説明
  - 6.1 水素貯蔵材料先端基盤研究事業
  - 6.2. 金属系水素貯蔵材料の基礎研究
  - 6.3. 非金属系水素貯蔵材料の基礎研究
  - 6.4. 中性子実験装置による水素貯蔵材料に関する共通基盤研
  - 6.5. 水素と材料の相互作用の実験的解明
  - 6.6. 計算科学的手法に基づく水素吸蔵材料の特性評価とメカニズム解明に関する研究

### <非公開の部>

7. 実用化の見通し

### <公開の部>

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

## 議事要旨

### (公開セッション)

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

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

### 3～4. 評価の実施方法と評価報告書の構成について

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

### 5. プロジェクトの概要説明

推進者（山本将道 NEDO新エネルギー部主任研究員）より資料5-1に基づき説明が行われた。

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

説明に対し以下の質疑応答が行われた。

#### 主な質疑応答

**【質問】** 東北大学の多元研と日産自動車に参加して開発された系を「ゼオライト系」と表現したようだが、これは、ゼオライト中で作る特別なカーボン（ゼオライト鋳型カーボン ZTC(Zeolite Templated Carbon)のことか？

**【回答】** そうです。計算科学と実験で新物質を作っていくということで取り込んだ。

**【質問】** 関連して、室温で驚異的吸着能を示しているが、成果に対する計算科学の寄与はどうか？

**【回答】** ゼオライトを利用して作ったカーボンは特殊な形状をしており、湾曲して水素を吸着している。例えばその湾曲の度合いと水素の吸着、あるいは吸着エネルギーを計算科学により計算し、その結果から、なぜこのカーボンが良いのか、更にどうしたら向上できるのかを検討してきた。

**【質問】** 46 億円強の予算のうち、高エネ研、原研の設備に使われた予算はどのくらいか？

**【回答】** 予算の配分は整理して、後で提出する。

**【質問】** 人材育成に関し、このプロジェクトにどのくらい若手研究者が携わり、プロジェクト終了後のそれらの人のキャリアパスはどうなっているか？

**【回答】** 事業原簿の4、「実用化の見通しについて」の3ページからの「波及効果」に記載されている。例えば、金属系グループの例では、博士研究員、特任研究員、テクニカルスタッフは7名、そのうち4名はプロジェクトの従事した後も引き続きポストを得て、水素貯蔵材料の研究開発に携わっている。人材の確保、育成に貢献したと考える。

**【質問】** 成果について、「指針を提供した」など、評価者としては評価し難い部分があるが？

**【回答】** 指針をどう解釈するか、指針の中身が重要と考える。午後のプロジェクトの詳細説明で具体的な発表のときに出した成果がどういう指針になったかを説明をするので、その価値を見極めて判断いただきたい。

**【質問】** NEDO や経済産業省の中だけで閉じるのではなく、この基礎科学の関係では文部科学省でも力を入

れているので、情報交換などで連携をとる必要はないか？また、このプロジェクトの公募があった時にどれくらいの公募があったか？

【回答】文科省等との連携については同様なことを考えている。燃料電池や水素の分野における基礎基盤的な領域で、NEDO は水素製造・輸送・貯蔵システム（圧縮水素容器、液体水素容器、水素貯蔵材料等）を主体的にサポートしていく、特にこの材料開発のところについては文科省側や JST 側とどういう連携が出来るのかという意見交換を始めている。公募については、1つの提案に対して他の良い提案も入れて、それらを統合して大きなプロジェクトにした。応募のあったいくつかのチームを合わせて1つのチームにしている。

【質問】成果を産業界のほうで実際に生かし、社会に還元されていくという流れで初めて産学官の連携が回るわけだが、こういう基礎研究の成果に関連してどういう業種の企業が実際に関連してきたのか？

【回答】すぐにモノにならないということで、自動車メーカーやユーザー側の企業が入りづらい分野であるが、これまで材料系メーカーに参画頂いている。今後、本当の意味でのブレークスルー、競争ということで新しくユーザー側、その他の開発材料メーカーにも広く声を掛けていく。来年度の新規のプロジェクトに向けて新しいプレーヤーをいかに呼び込めるかが課題である。

【質問】企業サイドとして、もう少し年次的にこの材料開発の方向性を示してもらわないと、検討の方向性が見えにくい？

【回答】燃料電池水素技術分野全体の見直しを含め、政策的な見直し等、産業界の実用化シナリオとも合わせながら、NEDO としての技術開発シナリオを点検していく。

【質問】FCV 以外の用途についてはどう考えるか？

【回答】一番難しい車載用タンクのスペックで良い技術が見出されれば、途中でも定置用に展開できると考えている。技術開発の進展に合わせてながら様々な展開も視野に入れてプロジェクトのマネジメントをしていく。

【コメント】現在走行している FCV 用高压容器は 70MPa と 35MPa の両方があるが、2015 年以降普及開始に向けた FCV はすべて 70MPa で提供することになっている。

【コメント】水素貯蔵材料に関して、これだけ集中的、徹底的に基本的事項を検討した例はない。このプロジェクトで行われたことは学術的にはすごく価値がある。今後、社会との連携、産業界との連携をもう少し見えるようにすると、外に向けての発表も説得力がある。

## 6. プロジェクトの詳細説明

### 6.1 水素貯蔵材料先端基盤研究事業

秋葉PLより資料6-1に基づき説明が行われた。説明に対し以下の質疑応答が行われた。

#### 主な質疑応答

【質問】開発した材料について、その温度、圧力等の範囲に条件はあるか。

【回答】温度などの条件は明示していないが、基本的には車載出来るものに収斂している。指針のほとんどは燃料電池自動車の車載に向いている材料開発のための指針になっている。

【質問】AlH<sub>3</sub> を超高压で合成できたことは成果として特筆されるが、合金や、あるいは Mg を検討するなど、他にも展開があったか？つまり、これまで Mg は合金の相手がいないため研究が進まなかったが、超高压下では合金化した結果はあるか？

【回答】午後に町田 SL から説明する。

【質問】最終目標は材料の開発指針を出すということだが、例えば 7.5wt% を超えるなど目標値を最初に設定したか？

【回答】水素製造・輸送・貯蔵というプロジェクトが NEDO 事業で既に始まっていて、そちらではクリアな目標値があったため、明確な区別をつける意味で本プロジェクトでは目標値は設定していない。

【質問】最初に目標値がなかったため、いろいろな材料について、これはこうしたらいいですよという指針が示されたが、その中からどんな材料で、どんな手法とすれば将来的に実用までいけるといいう指針がだせるか？

【回答】NEDO で、実際に材料を使う自動車会社 3 社も入られて、今年 1 年は調査研究を進めている。調査研究の中で、本プロジェクトで可能性を提示した中から産業界のほうで実際にやってみたいものを選択し、テーマをきちっと出し、企業が中心となって実用化を目指し、我々がそれをサポートするかたちで次の 5 年間研究開発を行い、良いものが出来たら、次は本当の実証に移るステージ構成だと理解している。

【質問】反応速度向上のための開発指針において実用面を考え、より材料に近いところで表面、界面の問題点や表面改質について検討していないのか？

【回答】表面を見るということであれば、表面分光がおそらくベストな方法。SPRING-8 の軟エックス線を使った表面分光等もプロジェクトの中で実施している。実用的な材料、例えば鉄チタンなど以前から表面に酸化物があって活性化しにくい物のメカニズムを知るというようなチャレンジもしている。

【質問】材料開発の立場から考えると、機能を決めている現象や機構、それと同時にそれを担う材料、物質自身の問題がある。本プロジェクトでは現象に重きを置いた研究が行われたとに理解していいか。また、具体的な物質として有望なものがいくつか見つかったという結果があるのか？

【回答】どちらかという、化学や材料科学的な観点での材料開発。水素と物質という関係では、文科省の水素アトミックスの研究会、我々のプロジェクト、材料開発のプロジェクトがあって、それで三位一体になる。

【質問】秘密保持契約は産総研と結ばれているのか？

【回答】まず産総研と企業との間で秘密保持契約を結び、それから産総研と HYDRO STAR のメンバーや他の事業のメンバーとで結ぶ。

【質問】例えば DOE が検討している MOF など液体窒素であれば優れた性能を示すものがあるが、本プロジ

ェクトでは全然やっていない。車では使えないということが前提か？

【回答】本プロジェクトではそのような前提をおいていないが、むしろ、我々の材料は室温で非常に高い水素貯蔵量があり、しかもそれを伸ばせるというときに、わざわざ 77K をやるということはなかった。個人的な意見だが、プレクールなどがあり、ステーションにある程度チラーがある場合、低温である程度吸着する材料があればそれを使うオプションも今後はありえる。

【コメント】これだけ集中して研究をやっているのだから、この材料を広く、定置型などいろいろな分野で使えるようなこともぜひ考えながらやっていけば良いのではないかと思う。

## 6.2. 金属系水素貯蔵材料の基礎研究

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

### 主な質疑応答

【質問】A2B4 構造を La、Ni ではなく、もっと Mg や Al などに適用して、理想的な別のものでも挟んで安定化された A2B4 では、究極的にどこまで水素が入るのか？また Mg の相手は？

【回答】現状では 2 (H/M) か 2 (H/M) をすこし上回る程度。その場合に A 元素を Ca とか、究極的には Mg、Al などの軽いものにしたときには 5wt% に届くか届かないかくらい。Mg の相手は Ni を考えている。もっと軽いものが適用できれば（重量あたりの吸蔵量が）もっとよくなる。

【質問】積層した場合どこで乖離吸着をするか。つまり積層する場合にどの表面が有効か？

【回答】表面がどの面になるかは、 casting したときの配向に依存する。

【質問】積層材料で、水素が溜まらないところを水素はどうやって移動するのか。また、溜まらないところの通過は実験の時間分解で見えるのではないか？

【回答】水素が溜まらないところでも、いくつか入るべきサイトがあるので、そこを拡散する。また、実験で確認できるような時間分解能は非常に難しい

【質問】こういう話は産業界の人にとって興味があるのか。また、特許は出願しているか？

【回答】ここから何らかの産業界の人が描いておられる材料のヒントになればいいと考えている。いくつかの産業界の方からはこういうのは面白い、使えそうだという話はいただいた。特許出願はしていない。

【質問】ほとんど反応速度のデータが紹介されていない。どれくらい拡散速度が上がったのか、あるいは、上がる可能性があるか。また、Mg-Ca-Ni 合金の反応速度は十分に実用的には対応できる速度か、さらに、表面律速だとケタ違いに大きく影響を受けることがあるが、こういう材料を積層すると水素の共有結合の乖離が促進されるようになることは確かめたか？

【回答】拡散については V 系の BCC 合金が対象で、他の材料については NMR 的にいまのところ研究はしていない。Mg-Ca-Ni 合金の反応速度は早い。室温付近で吸蔵放出するような合金、AB5 合金あるいはラーベス相合金に比べて特別遅いことはない。反応速度向上に関しては、バルクの中の拡散だけを考えるとというのはかなり片手落ちだということは承知している。

【質問】 残留水素の大きな原因の1つである空孔の相互作用で水素が出ると空孔も消えていくのか？

【回答】 特殊な構造を作った場合のみその空孔が消える。

【質問】 合金材料を圧力容器に充填することは簡単にできるか？

【回答】 ほとんど吸蔵合金に近いものばかりなので、簡単に空気中で粉碎し、この中に入れるということが可能だと考える。

【質問】 水素吸蔵量、耐久性、反応速度への粒径プラス構造の影響はどうか？

【回答】 粒子サイズの効果が効くようなところでの検討はしていない。今回の報告では溶解法で作って、バルクを粉碎して、100~500  $\mu\text{m}$  ぐらいの粒子サイズで実験したものがほとんど。粒子サイズが効くとすると割れや欠陥の入りやすさとかに効いてくる可能性はあるが、それ以外では粒子サイズが効くファクターがあるとは認識していない。

【質問】 死蔵について、ローワーハイドライドが出来るから死蔵だという単純な発想とは違うことを考えているか？

【回答】 ローワーハイドライドが出来る要因として、1つはそのハイドライドが安定だから、その中にある水素サイトを占有するのが安定だからということがあるが、それに加えて今回、空孔が中に残っていて、その空孔と残っている水素が複合体を形成し安定化することで、より安定になることが分かった。

【質問】 水素が固体の中に入っていると粒ではなく量子的な波動性を持っており、必ずしも一様に分布していないと思われるが、今回の実験手法で評価することが可能か？また、時間分解能はどれくらいか？

【回答】 バルク的に見ているので、我々の手法では難しい。分解能は実効的には 100Hz~125Hz 程度。

### 6.3. 非金属系水素貯蔵材料の基礎研究

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

#### 主な質疑応答

【質問】 11 ページのグラフの見方を教えて下さい。

【回答】 線は NEDO のロードマップで、丸は計算で出した理論値。

【質問】 Mg の系ですが、水素を吸着させる時に触媒が必要か？

【回答】 五酸化ニオブを触媒として使用している。

【質問】 吸蔵は Li と H の交換で進み、放出は逆の機構で進むのか。また繰り返しの吸蔵・放出は容易か？

【回答】 逆の機構以外にもう1つ機構があり、いったん  $\text{LiNH}_2$  が出来て、 $\text{LiNH}_2$  から  $\text{NH}_3$  が生成し、その  $\text{NH}_3$  を介在して水素放出反応が進んでいると考えている。繰り返しは数回なら出来ると思うが、何十回もやった経験はない。

【質問】 水素放出時の五酸化ニオブの酸化数は？また、LiH の電子状態は？

【回答】 NbO になっている。LiH の Li は  $\text{Li}^+$ 、H はプロトン、どこかで電荷バランスがとれている。

【質問】 窒化ボロンに水素が着くのは、何故付くのか？

【回答】 赤外の BH の伸縮 ( $2,500\text{cm}^{-1}$  付近) を検出している。ミリングで割れて、端に非常に活性な界面が出来、そこに水素が着いている。

【質問】 9 ページの図では右側がヒドラジンを使い再生する図で、この部分がロスアラモス研究所でやられているということか？

【回答】 そうです。アンモニアボランをヒドラジンのアンモニア溶液を使って再生できるということだったので、BN からでも可能ではないかと考え、検討を始めた。

【質問】 将来  $\text{BH}_3\text{NH}_3$  と  $\text{AlH}_3$  だというのは奇しくも DOE の結論とまったく同じだと思う。本 PJ はナノ複合化に特徴があるが、それによって、DOE が出来ないことが出来るか？

【回答】 水素化物と  $\text{BH}_3\text{NH}_3$  を組み合わせるナノ複合化は別の化合物が出来てしまうという問題があってどこも出来ない。低温でナノ複合化する手法を開発して初めて可能となった。例えば NaH と  $\text{BH}_3\text{NH}_3$  の複合材料を作った。そうするとこれまでの化合物に比べて水素量が 3%、4% 多い。その意味では、複合化させた状態で使ったほうが、より多くの水素を利用出来るという可能性がある。

【質問】  $\text{BH}_3\text{NH}_3$  系ではスラリーで使うとか、イオン液体に混ぜるとか、そういうことはもう考えなくてもいいか？

【回答】 そこから先のプロセスは利用形態になる。固体の最大の問題は充填率で、固体は出し入れが大変なので、プロセス的に非常に問題になってくる。

【質問】 燃料電池自動車への搭載が見通せるとのお考えだが、実際にどのように積むことを考えているか？

【回答】 カートリッジ方式で積む。そうすると水素が出た後に BN に近い構造が出来る。それをプラントに持って行き、そこで再生してまた再使用する。

【質問】 複合化、 $\text{BH}_3\text{NH}_3$  等の扱い方が難しいという印象しかないが、実用化の見通しは？

【回答】  $\text{BH}_3\text{NH}_3$  は非常に扱いやすい。白い粉末で、非常に安全な物質なので、これをうまく利用していくことが重要である。安全性を高めるのも重要な課題になってくる。

【コメント】 カートリッジ方式で積むにせよ、使用可能回数を抑えておく必要がある。また、燃料電池自動車への搭載にはコストが問題になる。

#### 6.4. 中性子実験装置による水素貯蔵材料に関する共通基盤研

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

主な質疑応答

【質問】例えば水素がジャンプしている中で移動は確認できるか？また、経時変化はどのくらいの速度まで追従できるか？

【回答】空間の実時間で見るという意味では、測定時間は短くとも数十ミリ秒のためちょっと難しい。しかし全散乱法は水素結合の寿命よりも十分に短い時間での、瞬間写真を撮ることで何らかの寿命を持つ構造をとらえることができる。ただし、非常に安定でサイト滞在時間が長いものは、いくら瞬間写真を撮ってもその違いは分からない。マイクロ秒で中性子の飛行時間を記録しているの、繰り返しが出来るとなれば、もっと短い時間で構造変化もとらえられる。

【質問】水素化アルミの表面の酸化アルミが 5nm ぐらいで存在がきちんと分かったというのは、優れた結果であるが、サンプルの中のカーボン含有についてはどうか。また、ナトリウムハイドライドで表面を処理するなどプラクティカルにやっている人に対して、分析したらこうだということでもさらに何か強いことが言えるか？

【回答】カーボンは入っていないという前提でやっているが、これはもう一度調べる。また、アモルファスも混ざっているようで、ちゃんとした表面の構造解析は出来ない。しかし、表面改質を行ったときに、同じ構造があるかどうかは区別出来る。そういう意味で何か改質を行った効果の比較は出来る。

【質問】前処理、測定、解析でこの装置の測定に要する時間はどれくらいか？費用対効果という意味で、今後この材料の測定のニーズを十分にこなせるだけの稼働率が見込めるかどうかと意味でコメントを願う。

【回答】解析の内容に依存する。フーリエ変換をする前提で、もともとシグナルが弱いところの統計精度を上げなければいけない場合には 8 時間測定している。リートベルト解析をするためだけであれば分オーダーとか、量が十分あれば秒オーダーで測定出来る。そういう意味では測定は目的にもよるが、非常に速く出来る。アモルファスや欠陥も含め、汚いもの、汚い構造、数式に乗りにくいものの構造解析は難しくて何日、1 週間とか時間がかかる。

【質問】NOVA の全散乱は重水素サンプル。水素で同じようにというのは現状では難しいか？

【回答】反跳効果の補正などがあり、リートベルト解析はうまく出来るが、それをフーリエ変換しようと思えば、反跳による歪みなどがうまく補正できないなどの問題がある。

【質問】非弾性散乱の時に今のようなその場観測的な時間変化が見える可能性はあるか？

【回答】軽水素であればこのエクサイテーションレベルのスプリッティングみたいなものも含め、分単位で出来る。今、J-PARC が 100kW という加速器のパワーで運転していて、1MW を目指しているの、10 倍になれば分オーダーで非弾性が取れるかもしれない。

【質問】水素の波動関数が見えるのは大変面白い。水素-水素の相関を見て、水素同士がどれくらい近付いているかというのはもうデータ解析をしているか？

【回答】VD2 は全部のサイトに詰まっているので水素はほとんど動いていない。もっと薄いところでは、どこかに水素が集まっていてムラが出来ているとか、そういうものを検討する。

【質問】本装置で開発された有望材料を測定して、評価し材料開発側にフィードバックができるか？

【回答】 良い材料と悪い材料とを受け取り、その差を検出することでどういう場合に何が良いのかを精度よくやっていくということが出来る。試料提供者に我々が結果をフィードバックして、それに対して試料提供者からのフィードバックがある、このやりとりで問題点が絞れる。

## 6.5. 水素と材料の相互作用の実験的解明

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

### 主な質疑応答

【質問】 16 ページの図で  $MgH_2$  の水素放出温度はもともと 560K くらい、だいたい 680K あたりにプロットするべきこの図はおかしいのでは？

【回答】 これは比較のためにすべて水素雰囲気中の DSC で同じ条件で比べたデータである。水素圧が 0.5 気圧であって、そこで DSC で速度論的に見ているので、速度論的なものと平衡を両方示しているという指摘はあるかと思うが、サンプル量が少ないので同じ条件で比較している。誤解を受けるような表現で申し訳ない。

【コメント】 指針の 1 番に Al に何か混ぜるといのが必要だとかいてあるが、これもあまりよくない。Ga のような融点の低いものを混ぜると良いとか、あるいは Ti のように原子半径が同じものを混ぜるのが良いという書き方をすべきである。

【質問】 Al を主体にして Mg を入れるというのは、従来の研究とはどこが違うのか？また AlH の共有結合の強さは CH 結合と比較してどうか？

【回答】 Al と H<sub>3</sub> の中のアルミを置換して、アルミと水素の結合状態と同じような結合状態をもつ S 金属、が出来ればさらに Al の H<sub>3</sub> の水素化物としての性能向上につながる可能性がある。また、アルミの H<sub>3</sub> とは全く異なる結晶構造をもつような、侵入型に近いような材料を合成する狙いもある。AlH の共有結合の強さについては、実験結果からだけでは結合の強弱に関しては定量的なことはいえないので、現在計算とも合せた研究を進めている。

【質問】 Eu が 2 価で、ある条件で 3 価になるという事実からどんなことが出来るか？また、2 価から 3 価になったというのはどうしてか？

【回答】 Eu 単体では、2 までしか水素量が入らなかった。その原因としては Eu が 2 価であるからということが実験的に示された。これが高压下では Eu 自体も 3 価が一般的で、3 価になると水素量が増える。それで、他の希土類と同じように 3 価であれば Eu も 2 以上、極端に言えば 3 まで入る条件は整う。今後、価数の制御を突き詰めていく必要があると考える。高压下で 3 価のほうが優勢なのは、3 価の方がイオン半径が小さくなり、圧縮によって安定化する。

【質問】 アルミの水素化反応と水素化過程については、合金化してアルミ合金のクラスターが出来て、その間を水素が透過し、アルミ合金へ入っていく、そういう意味か？この場合、クラスターでサイズ効果が効いているのか？

【回答】 水素化反応と水素化過程についてはそういうことである。サイズについては、大きければアルミニ

ウム自身が水素化を阻害するので、水素化物の収量としては減る方向にいく。アルミニウム単体が水素化する際には自己微細化現象が観測されている。

【質問】 成果の発表に関して、日本の英文雑誌には投稿されているか？

【回答】 *Material Transaction* などには投稿している。

【質問】 国際的な特許出願が見当たらないが、どういう意図か？

【回答】 独立行政法人になって所内で非常にシビアな査定がある。非常に厳しい審査を乗り越えて、これだけの数の特許出願をした。

## 6.6. 計算科学的手法に基づく水素吸蔵材料の特性評価とメカニズム解明に関する研究

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

### 主な質疑応答

【質問】 炭素系の材料で白金をつけた時、白金量はどのくらいか？吸着量の測定法は？

【回答】 直径が1~3nm くらいの白金微粒子を、2.3wt%つけた。吸着量は重量を測り、そこから水素を取り出し、吸蔵しない場合から、材料を入れたときに減少した圧力変化から算出している。JIS-7201 に準拠している。

【質問】 ZTC に吸着して、結局とれなかった水素というのはあるのか？

【回答】 いまは微粒子とか錯体でやっているのだから、減圧すればとれる。大きい微粒子のときはとれなかった。白金についている部分もあると考えている。昇温するととれるというのが何を意味するか完全には分かっていない。

【質問】 資料9 ページの ZTC+スピルオーバー水素による貯蔵量増大の図の表現が十分ではない。2.2%と言っていたものが、20 倍になったら 40%になったのかと思う。20 倍と示すときに実験条件を書き加えた方がよい。

【回答】 わかりました。

【質問】 ZTC の吸着量がグラファイトの曲率に依存するとの計算結果だが、曲率を変化させて吸着量を測定した実験結果はあるのか？また、水素の着き方が、この計算結果だと相当共有結合に近いような感じだが、例えば赤外で CH 結合が確認できるか？

【回答】 カーボンを一方向に押し湾曲を変えた。水素ではないが CO<sub>2</sub> の実験では吸着量は増えた。水素での高圧下の実験は困難なため、常圧で実験したら少し増えた。CH 結合の確認は実験的に困難である。スピルオーバーの計算結果では結合エネルギーが大きいのが、実際には非常に物理吸着に近い結合だと考えている。

【質問】 物理吸着に近い結合だと数百 kJ/mol という計算結果は桁違いに大きい？

【回答】 分子軌道計算の精度が絶対的にどれだけ変わるかどうかという話になってくる。これは傾向をあ

らわしている結果だと私たちは考えている。

【コメント】計算するとき炭素の動きも考慮する。でこぼこにして SP2 か SP3 にしておいて、それで結合を作って水素を着けて強い結合を作るけれども、それが上手に元の構造に直すようなモードも入れてシミュレーションし、引きはがすのに必要のないエネルギーがそれほど大きくならないことを示したら良い。

【質問】 スピルオーバーで実際に白金からカーボン上を動くというのはどのくらいの距離を動くか？

【回答】 それは分からない。白金は全面についているわけではないので。

【質問】 クラスレート水和物のヘルプガスがプロパンがよい理由は？ 結果は検証か、計算か？

【回答】 THF をやっている研究者が多く、0°C くらいまでいくという研究結果もある。しかし、THF だと少し大きすぎて、しかも量が必要なので水素が入る分が減ってしまう。多少他の特性を犠牲にしてもいいから、何か構造を支える部分を数か所まばらに入れて、他の空洞を何とか保持しながらそこに水素を入れてやる。メタン、エタン、プロパンと順番にいろいろやった結果、プロパンは多少大きめだが、THF よりは小さくて、それでマイナス 30°C くらいで、量と圧力の関係はあるが、最もよさそうだった。計算結果をもとに、実証を行いたい。

【質問】 THF を使った実験はオランダのほうで詳しい結果があり、状態図も出来ている。今回の計算法を THF に適用して状態図が再現出来るか。つまり、THF と水と水素の三元系で安定な状態が出来ることを計算して文献の実験結果との一致を確認し、計算の有効性を示せるか？

【回答】 THF ではやっていない。

【質問】 知的財産に関する戦略はどんな戦略か

【回答】 実験系では特許出願を積極的に行っている。しかし計算系では特許を書くという文化はあまり浸透していないので、実のところあまり戦略はない。

【コメント】 実験がナノテクノロジーの時代に入って実験するのが難しいから、計算でも特許を取るという姿勢が必要。我々（計算化学者）がしっかりやらないと、いつまでもたっても変わらないので、ぜひチャレンジしていただきたい。

(非公開セッション)

非公開資料取扱説明

## 7. 実用化の見通し

(非公開のため省略)

(公開セッション)

## 8. 全体を通しての質疑

【コメント】 実際には特許出願するのが難しくなっているのは事実だが、特許出願はもっと積極的にやれたと思う。国際特許出願もいろいろ支援をいただきながら、やれるレベルのものにもっていけばそれで

いいと思うので、このプロジェクトもそういうところは努力されたいのではないかと思います。

## 9. まとめ・講評

各評価委員から以下の講評があった。

【宮崎委員】このプロジェクトは実験、計算からの金属および非金属の吸着材料の構造、水素の吸蔵状態やその解析など、かなり多岐にわたり、それらがまとまってFCV用の水素貯蔵材料の開発ということがメインになる。我々としても非常に関係の深いところにいるので非常に期待している。来年度から次のステップのプロジェクトが始まるが、25年、30年先の最終目標はそれにかまわないと思うが、その途中で自動車用以外の他の用途への展開もぜひ、プロジェクトの中に入れて頂きたい。

【笠井委員】大型の設備の導入など、大型プロジェクトの難しさが分かった。地震の影響もあったので、普通の成果とは違うかたちで、これからの期待値も含め、これは成果なのだという評価もする必要があり、評価する側も考えなければいけないという印象を持った。次のステップに反映されることを期待したい。

【井上委員】この事業自体に数値目標はなく、目標値というものも度外視した純粋な基礎研究をするということでしたので、いい結果が出ている分については、今後を見通すという意味でも、期待もこめて結果に対してめりはりをつけて頂きたい。また、論文も質の良いところに沢山投稿していると思うが、基礎的な研究ですばらしい結果が出ているのであれば、例えばNatureとかScience誌に投稿されたと、個人的に思った。

【池田委員】2つコメントをさせて頂く。この技術は世界に誇れる戦略技術としてこれからも日本が世界をリードしていかなければいけないと思う。ぜひ知財も産学官で知恵を出し合い、守っていくことが必要だと考える。また、今後、ロードマップ等々の議論がされ、次の実用化に向けたプロジェクトもスタートすると思うが、次は開発の前提条件等をもう少し具体的にし、より出口が明確なプロジェクトとして設定し、取り組んでいただきたい。

【西宮分科会長代理】基礎研究から指針が出ることが本当にあり得るのかと思っていたが、A2B4セル、ナノ複合化、NiLi5など、いくつかそれができて、すばらしいと思った。安全についても相当大変な研究がこれからあると思うが、これは力を入れてやっていただきたい。中性子での表面解析はたぶん日本がいちばん進んでいると思うので、マシンタイムをどんどん開放して、材料屋がそれを駆使していい材料が出来るのを支援してほしい。計算化学については、現実のデータを再現出来ることを確認後、ここから先はこのような提案ができるというようにツーステップで進めて頂きたい。

【内田分科会長】基本的には早く水素吸蔵合金が電池のようによく商品化して、さらにまた発展すると良いと思う。その意味で、モビリティと定置型、例えばドイツやアメリカは燃料電池自動車に集中してかなり動きが激しい中で日本は戦っている。一方、定置型は日本が進んでいる。このようなことを考えると、今後、インフラを相当整備していかなければいけない。水素ステーションも始

めて、液体水素をどう扱っていくか、そういう所にもっと水素吸蔵材料が利用されていいのではないか。ぜひプロジェクトに関係された方も、少し広い視野をもって、もっとこんなことに使えるのではないだろうかということを積極的にトライして頂きたい。基礎研究にこれだけ集中したケースはたぶん世界にもないのではないか。ぜひ、これを基にして、今後さらに発展させていきたい。SPring-8、大きなJ-PARCなど、こういう手法が使えますよというのは、だいぶ出てきていますので、こういうことを糧に、さらに今度は産業界をもう少し明確に巻き込んで進めたら非常に良い気がする。論文、アカデミックアチーブメントという意味では非常に優秀だし、また人材育成という面でも成果があったと思う。今後の方向性をここで明確にして次のステップに行かれたら良いと思う。

8. 今後の予定、その他

9. 閉会

## 配付資料

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