

最先端・次世代研究開発支援プログラム
事後評価書

研究課題名	水素化物に隠された物性と機能性 －水素の存在状態の根源的探求からエネルギーデバイス 実証へ
研究機関・部局・職名	東北大学・原子分子材料科学高等研究機構・教授
氏名	折茂 慎一

【研究目的】

1) 交付申請時における研究の計画(課題Ⅰ～Ⅲは申請段階から統一して使用しておりますので、そのまま表記させて戴きます)、および 2) 研究の目標 (定量的な目標値は下線)

課題Ⅰ 水素の存在状態の混在性と外場による変化の解明

典型例としてマンガンを含むラーベス相構造をベースとした水素化物を合成し、水素圧力や温度などの外場により誘起される水素の存在状態の変化を、ラボX線回折測定やラマン分光測定、中性子回折測定や高輝度X線回折/XAFS測定、さらに理論・シミュレーションも含めた原子・電子構造解析により評価する。また、マンガン以外の多様な遷移金属を含むラーベス相構造、およびラーベス相構造以外の結晶構造をベースとした水素化物に関しても同様な評価を進める。

課題Ⅱ-i) 高機能水素化物の創製: 存在状態が変化することで水素密度が高まる水素化物

採択時の指摘事項①「テーマの絞込みを意識した柔軟な推進」への対策の観点から、本項目を重点的に実施する。また指摘事項②「基礎研究-開発研究-実用化のシナリオ作成、および各ステージでの技術課題の抽出と具体的・定量的な目標の設定」の観点から、「(存在状態の変化に伴う) 水素高密度化の促進」を基礎研究ステージでの技術課題として抽出し、その高密度化割合に関して、a) 1-1.3 倍程度 (23 年度)、b) 1.3-1.7 倍程度 (24 年度)、c) 1.7-2 倍以上 (25 年度)、の目標を設定する。

課題Ⅱ-ii) 高機能水素化物の創製: リチウムや水素などがイオン伝導する水素化物
上述の指摘事項①の観点から本項目は広域的な視野で実施する。具体的な材料系として、リチウムや資源性の観点から重要なナトリウム、さらに水素を含む多様な錯イオンに注目した錯体水素化物を合成し、外場によるイオン伝導性の向上に関する研究を進める。

課題Ⅱ-iii) 高機能水素化物の創製: 水素間距離が近接した水素化物

指摘事項①の観点から本項目も広域的な視野で実施する。具体的な材料系として遷移金属を含むペロブスカイト水素化物を合成して、外場による水素化物形成機構や物性に関する研究などを進める。

課題Ⅲ エネルギーデバイスとしての原理実証

上述の基礎研究ステージに続く開発研究（初期）ステージとして「可逆的な水素高密度化の促進」を技術課題として抽出するとともに、特に社会的に注目度が高い「（リチウム高速イオン伝導を示す錯体水素化物を固体電解質として用いた）新たな全固体リチウムイオン二次電池の開発」を目指したエネルギーデバイスとしての原理実証を進める。

【総合評価】

	特に優れた成果が得られている
○	優れた成果が得られている
	一定の成果が得られている
	十分な成果が得られていない

【所見】

① 総合所見

採択時に提出された「研究計画書」に記載されている課題に対する研究実施計画に対して、東日本大地震の影響を受けたにもかかわらず、研究は計画以上に進展しており、多くの研究成果を上げた。ペロブスカイト水素化物の形成過程が解明されたため、種々の元素を用いたペロブスカイト水素化物の合成研究と水素貯蔵や超伝導等の物性と機能性に関する研究へ発展と、錯体水素化物の「固体電気二重層キャパシタ」の展開に関する特許が出願され、新しいエネルギーデバイスへの応用技術への発展への基盤が構築できたと考え、新しい研究分野と社会的なニーズを生み出す波及効果が期待でき、「最先端・次世代研究開発支援プログラム」として十分な研究成果が上げられた。科学研究費補助金の採択により、平成 25 年度をもって本プログラムによる研究を廃止としている。

② 目的の達成状況

・所期の目的が

(全て達成された ・ 一部達成された ・ 達成されなかった)

採択時に提出された「研究計画書」に記載されている「1. 水素の存在状態の混在性と外場による変化の解明」、「2. 高機能水素化物の創成」と「3. エネルギーデバイスとしての原理実証」の3つの課題に対する研究実施計画に対して、東日本大地震の影響を受けたにも拘らず、研究は計画以上に進展しており、多くの研究成果が上げられたが、平成 25 年度に実施することを計画していた研究目的は完全には終了していない。このため、一部達成されたという評価としたが、採択時の指摘事項も十分に勘案して研究を推進しており、「最先端・次世代研究開発支援プログラム」として求められているレベルの研究成果は十分に達成されたと判断する。

③ 研究の成果
<ul style="list-style-type: none"> ・これまでの研究成果により判明した事実や開発した技術等に先進性・優位性が (<input checked="" type="checkbox"/>ある ・ <input type="checkbox"/>ない)
<ul style="list-style-type: none"> ・ブレークスルーと呼べるような特筆すべき研究成果が (<input checked="" type="checkbox"/>創出された ・ <input type="checkbox"/>創出されなかった)
<ul style="list-style-type: none"> ・当初の目的の他に得られた成果が (<input type="checkbox"/>ある ・ <input checked="" type="checkbox"/>ない)
<p>本研究開発支援プログラムにおいてペロブスカイト水素化物の形成過程が解明されたため、同水素化物の開発研究が活発に行われるようになり、固溶体水素化物を形成できる元素を組み合わせたペロブスカイト水素化物の合成研究への基盤が構築された。そして水素貯蔵や超伝導等の物性と機能性に関する研究へ発展する基礎が構築され、先進性と優位性、およびブレークスルーと呼べる特筆した研究成果は導出された。</p> <p>当初の目的の他に得られた成果はない。</p>

④ 研究成果の効果
<ul style="list-style-type: none"> ・研究成果は、関連する研究分野への波及効果が (<input checked="" type="checkbox"/>見込まれる ・ <input type="checkbox"/>見込まれない)
<ul style="list-style-type: none"> ・社会的・経済的な課題の解決への波及効果が (<input checked="" type="checkbox"/>見込まれる ・ <input type="checkbox"/>見込まれない)
<p>錯体水素化学の「固体電気二重層キャパシタ」の展開に関する特許を出願しており、新しいエネルギーデバイスへの応用技術への発展への基盤が構築できたと考えており、この研究グループを中心とする今後の研究開発への発展によっては研究分野への波及効果のみならず、社会的なニーズを生み出す波及効果も期待できる。</p>

⑤ 研究実施マネジメントの状況
<ul style="list-style-type: none"> ・適切なマネジメントが (<input checked="" type="checkbox"/>行われた ・ <input type="checkbox"/>行われなかった)
<p>研究代表者の優れた研究推進能力と研究体制の管理能力に基づき、研究スタッフとのミーティングを頻繁に実施することにより、研究計画以上の研究推進を実施しており、国内外の大学や研究機関との研究体制を確立して実施する等、適切な研究実施マネジメントが発揮された。</p>