

課題番号	GRO08
------	-------

**先端研究助成基金助成金(最先端・次世代研究開発支援プログラム)
実施状況報告書(平成22年度)**

本様式の内容は一般に公表されます

研究課題名	水素化物に隠された物性と機能性 ー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・金属材料研究所・教授
氏名	折 茂 慎 一

1. 当該年度の研究目的

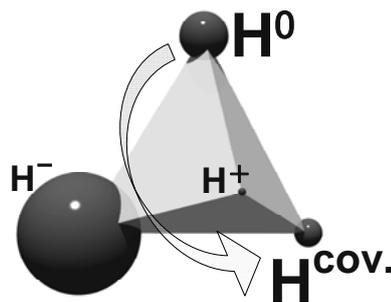
グリーン・イノベーションの推進に不可欠な「再生可能エネルギーやその高効率変換・貯蔵・輸送」に関する研究開発を加速するために、世界に先駆けて提唱した“水素ダイアグラム(水素の地図)”を用いて、水素化物に隠された物性と機能性を引き出すことを狙います。特に当該年度は、マンガンを含む水素化物を合成して、水素圧力や温度などの外場(周りの環境)により誘起される「水素の存在状態の変化」を実験・計算材料科学の両面から評価解析することを研究目的とします。

2. 研究の実施状況

水素との結合性の自由度が期待できるとともにユビキタス(ありふれた)元素でもあるマンガンを注目して、マンガンを含む金属間化合物を溶製、その後の水素処理によって水素化物を合成しました。そして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、粉末 X 線回折測定や X 線吸収微細構造測定、ラマン分光測定や水素定量分析などに基づいて実験的に評価解析するとともに、計算材料科学に基づく熱力学的な物性値の予測なども進めました。

その結果、現在までに以下の研究成果を得ました。

1) マンガンを含む水素化物に対して外場としての水素圧力を適切に制御することで、水素の存在状態を中性原子に近い状態から共有結合状態(水素が高密度化している状態)に変化させることに成功した。これは右図の“水素ダイアグラム”における H^0 から $H^{cov.}$ への変化に対応する。



2) 特に温度が 423K(150°C)の場合には、水素圧力が 50 気圧以下でもこの変化が十分に進行した。この水素圧力は従来報告されていた 1700 気圧と比較すると 1/30 以下と非常に低く、水素化物中の水素の高密度化(すなわち、燃料電池用水素貯蔵材料における水素量の増大やそれにとまなう燃料電池起動時間の向上)を実現するための新たな材料開発指針としてきわめて重要である。

3) 第一原理計算に基づく反応エンタルピーなどの物性値の予測によって、さらに低い水素圧力でもこの変化が進行することがわかった。

現在、マンガン以外の他のユビキタス元素を含む多くの水素化物を対象を拡張して、「水素の存在状態の変化」に関する熱力学的・速度論的な解析や支配因子の解明などを進めています。

様式19 別紙1

3. 研究発表等

雑誌論文	(掲載済み一査読有り) 計0件
計1件	(掲載済み一査読無し) 計0件 (未掲載) 計1件 Motoaki Matsuo, Kazutoshi Miwa, Satoshi Semboshi, Hai-Wen Li, Mika Kano, Shin-ichi Orimo, "First-principles studies of complex hydride YMn_2H_6 and its synthesis from metal hydride $YMn_2H_{4.5}$ " APPLIED PHYSICS LETTERS (査読有り・受理済み)
会議発表	専門家向け 計2件
計3件	折茂慎一 "エネルギー利用を目指した錯体水素化物の機能設計"(依頼講演) 名古屋市(名城大学), 2011年2月23日 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 折茂慎一 "Stability and Dynamics of Metal Borohydrides for Energy Applications"(招待講演) 仙台市(仙台国際センター), 2011年3月9日-10日 東北大学グローバルCOEプログラム / International Workshop on WATER DYNAMICS 一般向け 計1件 折茂慎一 "水素ダイアグラムで探る水素化物に隠された物性と機能性" 東京都(東京ビッグサイト), 2011年3月2日-4日 リードエグジジションジャパン / FC-EXPO(FC アカデミックフォーラム)
図書	
計0件	
産業財産権 出願・取得状 況	(取得済み) 計0件 (出願中) 計0件
計0件	
Webページ (URL)	http://www.hydrogen.imr.tohoku.ac.jp/
国民との科 学・技術対話 の実施状況	FC-EXPO(FC アカデミックフォーラム)での口頭発表・ポスター展示 東京都(東京ビッグサイト), 2011年3月2日-4日 口頭発表:約50名、ポスター展示:約500名 水素・燃料電池に関心を持つ一般から関連技術者・研究者までを対象として、水素化物中の水素の 多様な存在状態を体系的・一元的に捉える水素ダイアグラムなどについてわかりやすく紹介。
新聞・一般雑 誌等掲載	
計0件	
その他	該当なし

4. その他特記事項

東日本大震災のため中止された日本金属学会(平成23年3月25日~27日に東京都(東京都市大学)で予定)にて、功績賞受賞講演ならびにシンポジウム基調講演として本研究課題の研究内容・進捗状況を報告予定でした。これらに関する講演概要は同学会講演概要集(ISSN 1342-5730)に掲載されています。

実施状況報告書(平成22年度) 助成金の執行状況

本様式の内容は一般に公表されます

1. 助成金の受領状況(累計)

(単位:円)

	①交付決定額	②既受領額 (前年度迄の 累計)	③当該年度受 領額	④(=①-②- ③)未受領額
直接経費	124,000,000	0	42,160,000	81,840,000
間接経費	37,200,000	0	12,648,000	24,552,000
合計	161,200,000	0	54,808,000	106,392,000

2. 当該年度の収支状況

(単位:円)

	①前年度未執 行額	②当該年度受 領額	③当該年度受 取利息等額 (未収利息を 除く)	④(=①+②+ ③)当該年度 合計収入	⑤当該年度 執行額	⑥(=④-⑤) 当該年度未執 行額
直接経費	0	42,160,000	0	42,160,000	227,325	41,932,675
間接経費	0	12,648,000	0	12,648,000	60,000	12,588,000
合計	0	54,808,000	0	54,808,000	287,325	54,520,675

3. 当該年度の執行額内訳

(単位:円)

	金額	備考
物品費	122,325	ピラニー計 1台
旅費	0	
謝金・人件費等	0	
その他	105,000	研究概要広報パンフレット作成費 1000部
直接経費計	227,325	
間接経費計	60,000	
合計	287,325	

4. 当該年度の主な購入物品(1品又は1組若しくは1式の価格が50万円以上のもの)

物品名	仕様・型・性能 等	数量	単価 (単位:円)	金額 (単位:円)	納入 年月日	設置研究機関 名
				0		
				0		
				0		