

戦略的創造研究推進事業
—CREST・さきがけ複合領域—

研究領域「再生可能エネルギーからの
エネルギーキャリアの製造とその利用
のための革新的基盤技術の創出」

複合領域中間評価用資料

研究総括：江口 浩一

2018年2月

目次

1. 研究領域の概要	1
(1) 戦略目標	1
(2) 研究領域	6
(3) 研究総括	7
(4) 採択課題・研究費	8
2. 研究総括のねらい	12
3. 研究課題の選考について	13
(1) さきがけ	14
(2) CREST	17
(3) 複合領域として	19
4. 領域アドバイザーについて	20
5. 研究領域の運営について	22
(1) さきがけ	22
(2) CREST	25
(3) 複合領域として/共通事項	26
6. 研究の経過と所見	32
(1) さきがけ	32
(2) CREST	40
7. 総合所見	47

1. 研究領域の概要

(1) 戦略目標

① 戦略目標名

「再生可能エネルギーの輸送・貯蔵・利用に向けた革新的エネルギーキャリア利用基盤技術の創出」

② 達成目標

水素エネルギー社会の到来を控え、水素含有率、低環境負荷、取扱いの容易性等において総合的にエネルギーキャリア(エネルギーの輸送・貯蔵のための担体)としての利用にふさわしいものとなり得る窒素化合物や炭化水素、無機水素化物等の高効率変換・利用技術を創出する。そのために、以下の目標の達成を目指す。

- 再生可能エネルギーを効率的に化学的なエネルギー(エネルギーキャリア)に変換するための基盤技術の創出
- エネルギーキャリアから、電気エネルギーを取り出し利用するための基盤技術の創出
- エネルギーキャリアを安全に輸送・貯蔵する技術の創出

③ 将来実現し得る重要課題の達成ビジョン

本戦略目標下において「②達成目標」に向けた研究成果が得られることにより、太陽光、風力等の再生可能エネルギーを様々なエネルギーキャリアに変換するとともに、エネルギーキャリアを安全に輸送・貯蔵し、必要に応じて電力や動力、又は化成品原料として利用することを可能とする基盤技術が確立されることを目指す。これらの研究成果を民間企業につなげ、更に国内における再生可能エネルギーの負荷平準化に応用することにより、電力グリッドによらない再生可能エネルギーの新たな利用形態の確立を目指す。これにより、再生可能エネルギーを安定的かつ積極的に利用する社会の実現、水素エネルギー社会の到来に資するシステムの構築に貢献する。

また、本戦略目標において得られる技術を活用し、再生可能エネルギーの賦存量(ふぞんりょう)が大きい諸外国に技術を輸出することで相手国の経済成長に貢献するとともに、相手国の再生可能エネルギーを化学エネルギーの形態で大量に輸入することを可能とし、国内外の再生可能エネルギーの安定的利用に貢献することを目指す。

これにより第4期科学技術基本計画(2011年8月19日閣議決定)に掲げられた「エネルギー供給源の多様化と分散化」、「長期的に安定的なエネルギー需給構造の構築と世界最先端の低炭素社会の実現」の達成に貢献する。

④ 具体的内容

(背景)

我が国の電力需要を賄う一次エネルギー源として、再生可能エネルギーが占める割合を大幅に増やすためには、再生可能エネルギーが自然現象によることに起因する課題を克服しなくてはならない。例えば太陽光、風力等の再生可能エネルギーが得られる地域は国内外において偏っており、都市などのエネルギー消費地から遠隔であることが多い。季節や時間といった月・日・時間単位の変動が大きく、電力の需要と供給のピークが一致しない等の課題がある。

これら再生可能エネルギー特有のいわば地理的・時間的な課題を克服するための方策として、再生可能エネルギーによって生産される電力や熱を用いた化学変換により、その反応生成物にエネルギーを蓄え、エネルギーキャリアとして活用することが考えられる。これによりエネルギーキャリアを介してエネルギーを安全に輸送・貯蔵し、必要に応じて電力や動力、又は化成品原料として利用することが可能となる。変動の大きい再生可能エネルギー発電の負荷の平準化のためには、蓄電池以上に長期間にわたりエネルギーの出し入れが可能となるエネルギーキャリアの活用が有効である。

これまでの水素関連研究により、高効率化や低コスト化の課題は残るもののアルカリ水電解による水素生成技術はある程度確立している。しかし本格的な水素エネルギー社会を見据えると、水素の輸送・貯蔵における大きな課題が残る。水素を大量に輸送するためには、 -253°C まで冷却して液化しエネルギー密度を上げなくてはならないが、これには大きなエネルギーとコストを要する。海上の大規模輸送のみならず燃料電池自動車や家庭用燃料電池に供給するために都市に張り巡らすインフラ構築を考慮すると、これに代わる、水素含有率、低環境負荷、取扱いの容易性等に優れたエネルギーキャリアの利用技術を創出することが必要である。

(研究内容)

本戦略目標の達成には、これまでの水素関連研究とは異なった、新たな着想に基づく独創的研究が必須であり、触媒化学、電気化学、材料科学、プロセス工学などから新規の研究者が参入することが重要である。これらの研究者が同一の目標の下に集結・連携して各分野の知見を融合させた新しいエネルギーキャリア研究に挑むことによって、既存研究の延長線上にはない高効率なエネルギーキャリア合成・利用の基盤技術の確立を目指す。具体的には、以下の研究を想定する。

【エネルギーを変換する】

- (i) エネルギーキャリアを効率的に直接合成するための触媒化学的・電気化学的な技術やその機構解明のための研究
- (ii) 太陽熱や地熱を用いた熱化学プロセスによりエネルギーキャリアを合成するための研究
- (iii) その他、水素含有率、低環境負荷、取扱いの容易性等に優れたエネルギーキャリアとなる新規材料の創出・設計指針の構築や、光化学などにより水素や水を効率良くエネルギーキ

キャリアに変換するための研究

【エネルギーを利用する】

(i) エネルギーキャリアを燃料として用いて電気エネルギーを取り出す新しい直接燃料電池の研究

(ii) エネルギーキャリアから低温で高効率に水素を取り出す脱水素技術に関する研究

(iii) エネルギーキャリアを利用して有用化成品を直接合成する新規プロセスの研究

【エネルギーを安全に輸送・貯蔵する】

各エネルギーキャリアを安全に長距離輸送・長期間貯蔵するための研究

なお、研究が先行している有機ヒドライド、アンモニアについては、既存の合成方法とは全く異なる、例えば電気化学と触媒化学を融合させた新規電解合成による水素を介さない有機ヒドライド直接合成方法、希少金属や入手困難な還元剤を用いることなく窒素三重結合の解離を可能とする新規触媒開発によるアンモニア合成方法などを想定する。

⑤政策上の位置付け(政策体系における位置付け、政策上の必要性・緊急性等)

第4期科学技術基本計画では、「グリーンイノベーションの推進」は、我が国の将来にわたる成長と社会の発展を実現するための主要な柱の一つとして掲げられている。また、「II-3. グリーンイノベーションの推進」において、「製造・輸送・貯蔵にわたる水素供給システム」の研究開発とその海外展開が課題として挙げられている。本戦略目標では、水素をそのまま利用することに加えて、エネルギーの輸送・貯蔵・利用を可能とする新たなエネルギーキャリア利用技術を創出するための研究開発を国として推進することで、より多角的に再生可能エネルギーの導入拡大を図るものである。こうした取組は、第4期科学技術基本計画の「安定的なエネルギー供給と低炭素化」、「エネルギー利用の高効率化及びスマート化」及び「社会インフラのグリーン化」に貢献する。

エネルギー基本計画(2010年6月18日閣議決定)では、「新たなエネルギー社会の実現」として、「中長期的には水素エネルギーを有効活用する社会システムを構築していくこと」の重要性を指摘した上で「水素エネルギー社会の実現」を掲げている。当面は「化石燃料由来の水素を活用し、化石燃料の有効利用を図るとともに、製鉄所等からの副生水素等を活用する」が、将来的には「非化石エネルギー由来水素の開発・利用を推進する」としており、このためには本戦略目標下におけるエネルギーキャリアの利用基盤技術の確立が不可欠である。

さらに、「平成25年度科学技術重要施策アクションプラン」(2012年7月19日総合科学技術会議科学技術イノベーション政策推進専門調査会)においても、グリーンイノベーションの項目の重点的取組として、「革新的なエネルギー供給・貯蔵・輸送システムの創出」が掲げられている。

本戦略目標はこれらに貢献するものである。

⑥他の関連施策との連携及び役割分担・政策効果の違い

文部科学省・経済産業省合同検討会で、本研究開発分野の両省連携の重要性が認識されるに至った。経済産業省(経産省)では企業等における再生可能エネルギーからの低コスト水素製造技術開発等を推進していく一方、文部科学省(文科省)では革新的エネルギーキャリア変換・利用技術等を中心に研究を実施する。

文科省では、本戦略目標と国立研究開発法人科学技術振興機構(JST)の先端的低炭素化技術開発(ALCA)で分担・連携してエネルギーキャリアの研究開発を推進する。具体的には以下のとおりである。

エネルギーキャリアの実現に求められる研究開発は大きく二つのフェーズに分けられる。一つは産業界が既に着目しているものの、社会普及の前に大規模化や低コスト化が大きな障壁として立ち塞がり、単独企業の努力では突破不可能で産学連携による技術基盤の確立が不可欠なものである。これに該当するのが有機ハイドライド及びアンモニアである。2013年度よりALCAでは、この状況を打破するために、有機ハイドライド及びアンモニアを対象に最長10年の産学官の混成メンバーによる研究開発を実施し、経産省事業や産業に橋渡しすることを目指した。具体的には、例えば有機ハイドライドでは、電解合成、水素化・脱水素、有機ハイドライド燃料電池の研究開発を、アンモニアでは、熱化学合成、脱水素、アンモニア燃料電池の研究開発を予定する。

もう一つのフェーズは、いまだ実用性は可能性の域にあるものの利用技術を確立すれば有機ハイドライドやアンモニアを凌駕(りょうが)する新たなエネルギーキャリアとしての地位を確立できる新規物質、あるいは、有機ハイドライドやアンモニアに関してこれまで想定されてきた合成方法を根底から覆すような技術の創出である。本戦略目標ではこのフェーズに焦点を絞る。

本戦略目標及びALCAで得られた研究成果は、文科省及び経産省が共同で設置するガバナリングボードで共有し、有望な基礎技術が開発されれば速やかに次のフェーズへと橋渡ししていく等、単独のプロジェクトに完結させない連携体制をとる。

また、本戦略目標と同年に設定される戦略目標「選択的物質貯蔵・輸送・変換等を実現する物質中の微細な空間空隙構造制御技術による新機能材料の創製」とも選択的物質貯蔵・輸送・変換等を可能にする革新的な空間空隙材料の創製という観点で、得られた知見を共有するなど効果的な研究体制を推進していく必要がある。

⑦科学的裏付け(国内外の研究動向を踏まえた必要性・緊急性・実現可能性等)

我が国は、太陽電池発電所や風力発電所の設備に関する技術の輸出大国の一つであるが、そのエネルギーを輸入するための技術開発は皆無に等しい。国際的ビジョンにおける新エネルギー生産・輸送・貯蔵・利用に関する研究投資は多くなく、基礎技術から社会工学的視野までを俯瞰(ふかん)した研究が必須である。また、水素国際クリーンエネルギーシステム

技術(WE-NET)以降の電気化学、触媒化学、材料科学、プロセス工学などの個々の分野の進展と、その後の国立大学法人山梨大学の燃料電池ナノ材料研究サテライト拠点や国立大学法人九州大学の次世代燃料電池産学連携研究センターなどの集中的研究拠点の整備が総合的に結実した結果、燃料電池では世界最高水準の研究開発を誇っている。燃料電池の要素技術開発によって得られた基礎的知見は、エネルギーキャリアの研究開発につながるものが多い。さらに、エネルギーキャリアの基盤技術において鍵となる触媒に関しても、材料開発及び有機合成を中心とする反応研究で極めて高い研究水準を維持しているとともに、米国に次いで世界第2位の触媒生産国であり、基礎研究と産業の双方において世界をリードしている※1。

エネルギーキャリアを共通目標に掲げ、関連分野の世界最高水準の科学的ポテンシャルを活用しこれらの連携・融合を一層促進することによって、我が国はエネルギーキャリアの基盤技術を世界にさきがけて確立することができる。

米国エネルギー省(DOE)では、太陽エネルギーを燃料に変換する技術(ソーラーフュエル)や反応の触媒研究などが実施されている。また、欧州第七次研究枠組み計画(FP7)においても、ソーラーフュエルや電解あるいは熱による水素製造に関するプロジェクトが実施されている。こういった国際的な研究開発動向の中、日本、中国、ドイツ、米国におけるエネルギーキャリアに関する研究論文数はここ数年増加している。日本は米国、中国、ドイツに次いで第4位を維持するものの、その数は米国の1/4、中国の1/3にとどまり、5年前よりも差は拡大しつつある※2。

日本では、過去にWE-NETにおいて、水素の利用技術を中心としてエネルギーキャリアに取り組んだ経緯もあるが、最近の米国DOEや欧州での取組を踏まえ、さらに関連分野の科学的水準が世界トップクラスであるというポテンシャルを生かして、再生可能エネルギーの地理的・時間的な課題を克服し、それを輸送・貯蔵が可能な状態に効率的に変換して消費地に安定供給するための技術を確立する必要がある。

※1 JST 研究開発戦略センター(JST/CRDS)、『ナノテクノロジー・材料分野 科学技術・研究開発の国際比較 2011年版』、2011

※2 トムソン・ロイター「WEB OF KNOWLEDGE」〈<http://wokinfo.com/>〉

本戦略目標に関するキーワードを設定し、2007～2011年の原著論文数を検索した結果に基づく。

⑧検討の経緯

東日本大震災復興の観点から、再生可能エネルギーを積極的に利用するための関連技術の必要性を認め、JST/CRDS 環境・エネルギーユニットにおいて検討を開始し、再生可能エネルギーを化学エネルギーに変換、また化学エネルギーから電力へ変換し利用するために取り組むべき技術課題や、研究開発の方向性などについて、有識者へのインタビューなどに

よる予備調査を実施した。その後、詳細検討チームを発足させ、科学技術未来戦略ワークショップ「再生可能エネルギーの輸送・貯蔵・利用に向けたエネルギーキャリアの基盤技術」を開催(2012年7月28日)した。多分野の研究者により具体的な研究開発課題及び推進方策等について検討を行い、

- ・再生可能エネルギー又はそれを基とした電力からのエネルギーキャリアへの変換技術における研究課題

- ・エネルギーキャリア間やキャリアから電力や動力への変換技術の研究課題

などの俯瞰整理を進めた。これらの検討結果を取りまとめ、戦略プロポーザル「再生可能エネルギーの輸送・貯蔵・利用に向けたエネルギーキャリアの基盤技術」が2013年3月に発行された。

他方、文科省では、経産省との合同検討会を開催し、上記のJST/CRDSの検討も踏まえながら両省が連携して2030年頃の実用化を目指して取り組むべき革新的技術について議論し、その一つとして「エネルギー貯蔵・輸送」が特定されるに至った。さらに、合同検討会の下に本技術を議論するため両省と学識経験者等からなるワーキンググループを設置し、2013年2月までに7回にわたり会議を行って、両省の役割や連携の仕組みについて議論を続けてきた。

本戦略目標は、これらの検討の結果を踏まえて作成したものである。

(2) 研究領域

「再生可能エネルギーからのエネルギーキャリアの製造とその利用のための革新的基盤技術の創出」(2013年度発足)

本研究領域は、再生可能エネルギーを安定的・効率的に利用する水素エネルギー社会の実現に向け、再生可能エネルギーを化学エネルギーの貯蔵・輸送の担体となるエネルギーキャリアに効率的に変換し、さらに、エネルギーキャリアから電気エネルギー、水素、動力等を取り出して利用する基礎的・基盤的技術の創出を目指すものである。そのために、電気化学・触媒化学・材料科学・プロセス工学といった分野の垣根にとらわれない異分野間の融合型研究を推進してきた。例えば、風力・太陽光などの再生可能エネルギーを利用してエネルギーキャリアを効率的に直接合成するための電解合成、触媒合成、電極・反応場材料に関する研究、太陽熱・地熱を用いた熱化学プロセスによりエネルギーキャリアを合成するための研究を対象としている。また、エネルギーキャリアを燃料として用い電気エネルギーを取り出す直接燃料電池や、エネルギーキャリアから低温で高効率に水素を取り出す脱水素技術に関する研究も含めるものとした。

本研究領域では、研究が先行している有機ハイドライド、アンモニアを水素含有率、変換効率、安全性において凌駕する新規エネルギーキャリアの合成・利用に資する先導的な研究を推奨してきた。一方で、これら既知のエネルギーキャリアを対象とする研究であっても、

これまで想定されてきた合成・利用・貯蔵運搬方法とは異なる、新たな着想に基づく独創的な技術であれば、本研究領域の採択対象とした。



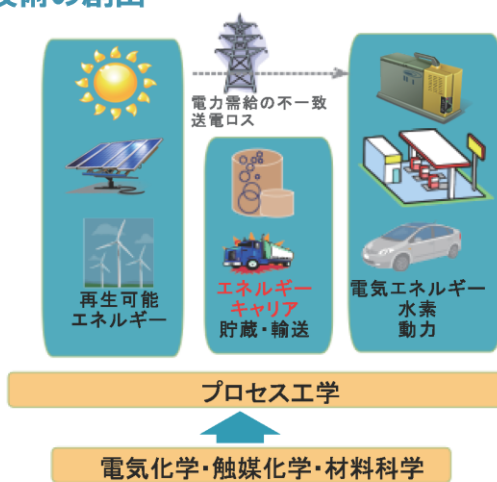
研究領域の概要

再生可能エネルギーからのエネルギーキャリアの製造とその利用のための革新的基盤技術の創出

研究総括 京都大学大学院工学研究科
教授 江口 浩一

概要 ○電気化学、触媒化学、材料科学、プロセス工学の異分野間の融合型研究
○既知キャリア(有機ハイドライド、 NH_3)を凌駕する新規 **エネルギーキャリア(EC)** の合成・利用に資する先導的研究
○既知の **EC** であっても既存の合成・利用方法とは異なる新たな着想に基づく創造的技術

水素エネルギー社会の実現に資する
基礎的・基盤的技術の創出



(3) 研究総括

江口 浩一 (京都大学 大学院工学研究科 教授)

(4) 採択課題・研究費

① さきがけ

(百万円)

採択年度	研究者	中間評価時 所属・役職	研究課題	研究費*
2013 年度	青木 芳尚	北海道大学 大学 院工学研究院 准 教授	中温領域で作動する直接ア ンモニア形水素膜燃料電池 の創製	36.3
	大木 靖弘	名古屋大学 大学 院理学研究科 准 教授	鉄族クラスター分子触媒の 創出とエネルギーキャリア の合成	32
	中村 寿	東北大学 流体科 学研究所 准教授	低エクセルギー損失・CO ₂ 無 排出燃焼の実現に向けたア ンモニア燃焼化学反応機構 の解明	32
	日隈 聡士	熊本大学 大学院 先端科学研究部 助教	ゼロエミッションを実現す るアンモニア燃焼触媒の物 質設計と応用	32.9
2014 年度	小林 洋治	京都大学 大学院 工学研究科 講師	酸水素化物による新しいア ンモニア合成触媒	44.7
	白石 康浩	大阪大学 太陽エ ネルギー化学研究 センター 准教授	太陽光により水と酸素から 過酸化水素を合成する革新 的触媒の開発	43.5
	辻口 拓也	金沢大学 理工研 究域 助教	固体高分子形燃料電池の代 替を実現する直接ギ酸形燃 料電池の開発	44
	脇坂 暢	富山県立大学 工 学部 准教授	液-液-固三相界面構造を 制御した有機ハイドライド 電解合成	33.4
2015 年度	伊藤 良一	筑波大学 数理物 質系 准教授	水素ステーション普及のた めの貴金属を使用しない大 規模水素生産材料の開発	43.4
	橋本 望	北海道大学 大学 院工学研究院 機 械宇宙工学部門	エネルギーキャリアとして のアンモニア普及へ向けた 難燃性固体燃料とアンモニ	41

		准教授	アの混焼による着火特性改善効果の解明	
	嶺岸 耕	東京大学 大学院 工学系研究科 准教授	メンブレン一体型光触媒シートの開発と人工光合成反応系の構築	41.9
	森 浩亮	大阪大学 大学院 工学研究科 准教授	ギ酸からの高効率水素発生を駆動する多機能集積型金属触媒の開発	41.1
			総研究費	466.3

*研究費：2017年度上期までの実績額に2017年度下期以降の計画額を加算した金額
1万円以下の金額は切り捨てとした

②CREST

(百万円)

採択 年度	研究代表者	中間評価時 所属・役職	研究課題	研究費*
2013 年度	永岡 勝俊	大分大学 理工学部 准教授	エネルギーキャリアとしてのアンモニアを合成・分解するための特殊反応場の構築に関する基盤技術の創成	229
	姫田 雄一 郎	産業技術総合研究所 エネルギー触媒技術 グループ 上級主任 研究員	ギ酸の脱水素化反応による高圧水素の高効率製造技術の開発	234
	藤代 芳伸	産業技術総合研究所 材料・化学領域研究戦 略部 研究企画室 室長	新規固体酸化物形共電解反応セルを用いた革新的エネルギーキャリア合成技術(キャリアファーム共電解技術)の開発	183
2014 年度	里川 重夫	成蹊大学 理工学部 教授	固体電解質を用いた電解セルの電極触媒高性能化によるアンモニア合成システムの開発	204
	曾根 理嗣	宇宙航空研究開発機 構 宇宙科学研究所 准教授	再生可能エネルギー利用による水素製造とエネルギーキャリアとしてのメタン製造技術の研究	204
	西村 睦	物質・材料研究機構 経営企画部門 部門 長	バナジウム系合金膜による次世代エネルギーキャリアからの革新的水素分離・精製基盤技術の創出	246
2015 年度	西林 仁昭	東京大学 大学院工 学系研究科 教授	分子触媒を利用した革新的アンモニア合成及び関連反応の開発	202
	山内 美穂	九州大学 カーボン ニュートラル・エネル ギー国際研究所 教 授	ナノハイブリッド材料創製に基づくクリーンアルコール合成システムのデザインと構築	185
	山口 猛央	東京工業大学 科学 技術創成研究院 教	液体燃料直接型固体アルカリ燃料電池用触媒層および MEA 基盤	180

		授	技術の構築	
			総研究費	1,867

*研究費：2017年度上期までの実績額に2017年度下期以降の計画額を加算した金額

2. 研究総括のねらい

(1) 戦略目標に対する研究総括の狙い

我が国のエネルギー問題については、長期のビジョンが必要であり、再生可能エネルギーをいかにして主たるエネルギー源へと成長させていくかは、究極のエネルギー問題解決へ向けての重要な課題である。しかし、自然現象に由来する太陽光、風力等の再生可能エネルギーを大規模に導入するためには、エネルギー生産地が消費地から遠隔であり、また、季節や時間による変動が大きく、電力の需要と供給のピークが一致しないという本質的な障害を克服する必要がある。

これら再生可能エネルギー特有の課題を解決するための方策として、再生可能エネルギーによって生産される電力や熱から、水素を含有するエネルギー貯蔵媒体(エネルギーキャリア)に転換し、安全に輸送・貯蔵を行い、必要に応じて消費地でエネルギーキャリアを電力や動力、熱に変換して利用することが考えられる。このような目的からは蓄電池にも期待が寄せられているが、上述のエネルギーキャリアは化学物質の形で蓄電池以上に高い密度でエネルギーを貯蔵することができ、それ自体が軽量で遠距離へ運搬でき、長期にわたって保存でき、エネルギーの出し入れが可能となるなど、化学的性質を生かした、注目に値する特徴がある。また、種々のエネルギーキャリア候補物質の中でも、貯蔵の密度、時間的な安定性、製造・利用の容易さ、導入の難易などが異なっており、使用する目的と場所によって選択する必要も考えられる。エネルギーキャリアの候補となる化学物質は、たとえばメチルシクロヘキサンなどの有機ヒドライド、アンモニアなどが有力と考えられている。再生可能エネルギーから、水素製造、エネルギーキャリアへの変換、貯蔵・輸送、電力や燃焼エネルギーとしての利用などにおけるそれぞれのエネルギーキャリア物質の優位性を明確にし、最適のシステムを選択し、構築していくことが必要である。

エネルギーキャリアについては、総合科学技術・イノベーション会議が主導して各省庁が連携する、戦略的イノベーション創造プログラム(SIP)の一課題として採択され、2014年度から開始した。SIP エネルギーキャリアプログラムでは、エネルギーキャリアとして有力視されている、液体水素、アンモニア、有機ヒドライド、の製造と利用に関するテーマ、及びこれらの安全性評価に関するテーマが重点的に推進されている。

一方、エネルギーキャリアの新規な製造方法、電気化学的な物質・エネルギー相互変換、熱機関をはじめとする利用、その化学的性質を生かした新規な利用技術、Life Cycle Assessment(LCA)解析はこれまで、将来を見据えて系統だって検討される段階になく、いまだに多くの革新的、効果的方法が提案、評価されずに残されている未開拓領域である。

このような背景から、本研究領域では、有機ヒドライドやアンモニアだけでなく、他のエネルギーキャリアも含め、電気化学・触媒化学・材料科学・プロセス工学のそれぞれの視点から基礎的・基盤的な研究開発を実施するための枠組みを設けて、シーズを発掘し、その成果を将来のエネルギーキャリアを利用したエネルギーシステムに活用することを目的と

した。その目的を達成するため、上記諸分野の研究者の有機的な協働と共に、個人研究者の独創的な発想を活かした挑戦的なテーマによる成果も期待されることから、実施体制として CREST 及びさきがけの 2 つのタイプの複合領域を設定した。CREST・さきがけは共通の課題解決を目指す、それぞれの制度の特徴を生かしつつ、一体として運営し、相互に意見・情報を交換する機会を多数設けることとした。また、本研究領域のプロジェクトを推進していく過程で、CREST・さきがけ内での研究チーム、研究者間の連携のみならず、他の研究領域や国の関係プロジェクトなどとの連携を積極的に推進した。

(2) 本研究領域の狙い、研究成果として目指したこと

エネルギーキャリアの可能性を判断するためには量的な評価も重視した。将来、大量の再生可能エネルギーを対象とするためには、少なくとも工業規模で生産、使用する必要がある。ただし、さきがけ及び CREST の研究のステージとしては萌芽的領域あるいは開発初期段階にあるため、実証規模の評価は困難であることがほとんどである。そのような観点から各研究課題について小規模システムからの大規模化の可能性評価やシミュレーションを積極的に採用して、予測や将来展望を推定する方針を指導した。そのため工業的生産の規模で製造速度が達成可能か、またエネルギー収支の点から十分エネルギーシステム内に組み込めるのか適応性からの確に可能性を評価し、助言を与えるとともに、成果に結びつくよう指導を行った。化学反応などは新規で革新性があっても、量的拡大ができないもの、エネルギー収支的に受け入れられないものもあり、できるだけ量的視点からの考察をお願いした。

(3) 科学技術の進歩への貢献科学技術イノベーション創出に向けて目指したこと

エネルギーキャリアの製造と利用を目的としているが、学術領域の基盤としての貢献が重要であることはもちろんである。新規触媒や新規電気化学デバイス、分離材料、燃焼解析など将来の学術基盤となるような研究に導くことを目指した。研究対象とした材料、反応、デバイスのエネルギーキャリアとしての将来性を見極めることは重要であるが、CREST・さきがけ研究はシーズ的側面も強いいためそれらの材料等の新規性、特許性について留意し、企業からのアドバイスも積極的に受け入れて知財戦略とした。

3. 研究課題の選考について

本研究領域では再生可能エネルギーに基づく熱や電力を使用して、直接もしくは水素の生成を経由し、低コストかつ高効率にエネルギーキャリアを製造、エネルギー消費地で損失なくエネルギーを取り出して利用するという一連のプロセスを想定している。本研究領域の募集選考においては、この一連のプロセスの全体あるいは一部についての革新的、挑戦的な研究提案を期待した。また、エネルギーキャリアの製造や使用全体をとおして安全性、貯蔵・輸送方法などを提案評価する研究も対象とし、トータルシステムに受け入れられるための、使用目的によるエネルギーキャリアの区別など、LCA 的な観点からの評価に関する研究

も含まれるものとした。さらに、現時点でエネルギーキャリアとしての認知度は高くないものの、高い効率で製造、利用が可能な新規なエネルギーキャリアについての提案を歓迎した。これらの提案には単に水素に係る反応の学術的興味からだけでなく、エネルギーキャリアとしての優位性、潜在的能力、導入シナリオなどの説明が記されていることを必要とした。

バイオマス、バイオ燃料由来の再生可能エネルギーの利用、光触媒による水素製造や人工光合成、化石燃料の高効率利用、工業プロセスで副生する水素の利用などに関する研究は、すでに他の複数のプロジェクトで精力的に検討されていたため、2013、2014年度では本研究領域の募集の対象外とした。しかし、エネルギーキャリアの研究は複数の既存の研究の枠組みの複合領域・境界領域からなるものであり、例えば、光触媒による水素キャリア製造、化石燃料、副生水素、バイオ燃料などからのエネルギーキャリア物質への変換なども、先に述べた再生可能エネルギーからの安定なエネルギーキャリア物質の製造、輸送、利用、安全性に寄与する技術となりうる可能性がある。そこで、本研究領域に取り込むべき技術領域を明確にするために、このような境界領域にあっても、エネルギーキャリアとしての可能性、発展性を強く期待できる提案に対して2015年度では募集の対象とした。

エネルギーキャリアを取り扱う体系はいまだはっきりとは確立されておらず、CREST及びさきがけの研究領域を実施していく過程で、課題中間評価の段階で重点項目を選択し、強化、方針の展開などを決定していくこととした。そのため、本研究領域の開始時には、できるだけ多様なテーマの研究課題を採択するために、CRESTでは採択時の研究費総額の上限を1研究課題あたり2億円として提案の募集を行った。

CRESTではチームリーダーのもと、特定のエネルギーキャリアの革新的な製造や利用方法の構想について、複数の側面から戦略的に検討するチーム型研究を、さきがけでは実現性が現時点で不明確であっても、将来、エネルギーキャリアの利用体系の中で重要な位置を占める可能性のある萌芽的な個人型研究をそれぞれ募集した。長期の視野を持って進めるべきエネルギーキャリアの製造・利用基盤技術に関する、革新的・創造的提案を歓迎するものとした。以下に各年度での詳細を述べる。

(1) さきがけ

① 研究課題の選考方針

さきがけではアンモニア、有機ヒドライドなど、既知のエネルギーキャリアはもちろん、特に独創的・革新的なエネルギーキャリア物質の提案、製造法、利用法などを募集対象とした。特に、下記3点およびそれらのバランスを重要視して選考に望んだ。

- (i) エネルギーキャリアはその候補物質や製造方法、利用システムなど、さきがけにふさわしい革新的、挑戦的な課題を重視して採択する。
- (ii) 将来のエネルギーキャリアとしての実現性や、エネルギーシステムへの導入の優位性、将来、量的に許容される可能性が十分ある点も重要視する。
- (iii) さきがけは個人型研究を対象としており、エネルギーキャリアの新領域を開拓して

いく意欲にあふれ、柔軟に対応しながら課題の解決、社会への対応をできる人材育成の可能性も意識する。

②選考結果

〈2013年度〉

2013年度は38件の応募があり、書類選考を通じて候補課題を12件に絞り、面接選考を経て最終的に4件の研究提案を採択した。採択課題は直接アンモニア形水素膜燃料電池の開発、新規分子性アンモニア合成触媒の開発、アンモニア燃焼化学反応機構の解明、アンモニア燃焼触媒の開発に関するものとなった。

2013年度の研究提案においては、研究内容自体は基礎研究として新規性に優れたものが多数あり、エネルギーキャリアという領域を広くとらえて、可能性を開拓するという点では注目される提案がみられた。一方で、新規性はあるものの、現在の専門をエネルギーキャリア領域に少しだけ軌道修正したような研究や、新規性のみで実現性が疑問視されるような研究提案も多くみられ、アンモニアや有機ハイドライド以外の新規なエネルギーキャリアの提案は期待したほど多くなかった。

当年度は第1回目の公募だったので、エネルギーキャリアとしての実現性、有効性を十分に提案書の中で説明できておらず、準備期間が少々不足していると感じる提案が多くあった。反応の面白さ、触媒の新規性、合成法の新規性など興味ある提案は多いので、エネルギーキャリア領域の創成を意識して、新たに提案がなされることを期待した。

〈2014年度〉

2014年度は36件の応募があり、書類選考を通じて候補課題を12件に絞り、面接選考を経て最終的に4件の研究提案を採択した。採択課題はアンモニア合成触媒の開発、過酸化水素合成光触媒の開発、直接ギ酸型燃料電池の開発、有機ハイドライドの電解合成技術に関するものとなった。

昨年度の公募とほぼ同数の応募が集まったが、内容的にはエネルギーキャリアとしての有効性を意識した提案が増え、個人の専門領域を形式上エネルギーキャリアに当てはめたような提案が減り、本研究領域の目標の理解度が上がっていることが感じられた。さらに新規性という点では、多くの提案が注目されるものだった。今回は、アンモニアや有機ハイドライドだけではなく、それ以外の新規なエネルギーキャリアの提案も多くみられ、どのような尺度でそれらを比較し、順位づけを行うか、アドバイザーとともに大いに議論することとなった。今回は結果的に、過酸化水素とギ酸をエネルギーキャリアとして合成・利用する研究課題の採択に至った。一方で新規性がある萌芽的提案であっても、将来性、実現性が疑問視されるような研究提案も一部みられた。

2014年度は第2回目の公募だったので、準備状況や出口イメージを強調してある提案も多く、次回このような記述を盛り込んだ優れた応募が多く集まることが期待された。また、

反応の面白さ、触媒の新規性、合成法の新規性などの点では興味ある提案も多くあったので、エネルギーキャリア領域の創成を意識して、再度提案されることを期待した。

〈2015年度〉

2015年度は過去最多の42件の応募があり、書類選考を通じて候補課題を12件に絞り、面接選考を経て最終的に4件の研究提案を採択した。採択課題は水電解による水素生産のための電極開発、アンモニアの混焼による難燃性固体燃料の着火特性改善効果の解明、メチルシクロヘキサン生産のための光触媒シートおよび人工光合成系の構築、多機能集積型ギ酸の合成・分解触媒の開発に関するものとなった。

燃料電池自動車や水素ステーションなど水素社会の関心の高さを反映して、意欲的な興味深い提案が見られた。多様なエネルギーキャリア物質の提案が含まれ、合成から利用、社会への適応性などまで過去2回に比べ、提案内容に多様性が増しており、本研究領域の目標の理解度は上がっていると感じられた。さらに新規性という点では、多くの提案が注目されるものであった。

今回も準備状況や出口イメージが明確に示された提案が多くあったが、その中でも採択課題は、エネルギーキャリアとしての反応の重要性、触媒や合成法の新規性なども主張されており、エネルギーキャリア領域の創成を意識して研究を推進することが期待された。

③選考結果のまとめと運営方針

3年間にわたって、12件の課題を採択した。研究課題名は下記の通りである。

- 1) 中温領域で作動する直接アンモニア形水素膜燃料電池の創製
- 2) 鉄族クラスター分子触媒の創出とエネルギーキャリアの合成
- 3) 低エクセルギー損失・CO₂無排出燃焼の実現に向けたアンモニア燃焼化学反応機構の解明
- 4) ゼロエミッションを実現するアンモニア燃焼触媒の物質設計と応用
- 5) 酸水素化物による新しいアンモニア合成触媒
- 6) 太陽光により水と酸素から過酸化水素を合成する革新的光触媒の開発
- 7) 固体高分子形燃料電池の代替を実現する直接ギ酸形燃料電池の開発
- 8) 液-液-固三相界面構造を制御した有機ハイドライド電解合成
- 9) 水素ステーション普及のための貴金属を使用しない大規模水素生産材料の開発
- 10) エネルギーキャリアとしてのアンモニア普及へ向けた難燃性固体燃料とアンモニアの混焼による着火特性改善効果の解明
- 11) メンブレン一体型光触媒シートの開発と人工光合成反応系の構築
- 12) ギ酸からの高効率水素発生を駆動する多機能集積型金属触媒の開発

(2)CREST

①研究課題の選考方針

本研究領域の目標を着実に達成するため、CREST では以下の視点を重要視した。

- (i) エネルギーキャリア研究は端緒についての段階であるため、新規性、発展性が最も重要と判断した。
- (ii) エネルギーキャリアは、将来、大量に製造、貯蔵、輸送することを念頭に置いている。この観点から、将来、エネルギーシステムとして受容可能で、十分な反応量を達成できることが重要と判断した。
- (iii) 他の省庁のプロジェクトで推進されている、人工光合成や光触媒、バイオ燃料・化石燃料の高効率利用などの課題は 2013 年度、2014 年度の募集対象としなかった。2015 年度の募集では境界領域の課題も採択し、空白な領域を避けるためこれらとの境界領域も募集対象とした。

また、反応の興味が中心で、量的な可能性が考察・評価がなされていないもの、エネルギーシステムとして受け入れ可能か説明がないもの、期間内にどこまで達成しようとしているか目標が明確でない提案も多くみられたが、これらは不採択とした。

②選考結果

<2013 年度>

2013 年度は 29 件の応募があり、9 件の面接選考を経て、最終的に 3 件の研究提案を採択した。

新規なエネルギーキャリア物質と利用システムの提案を期待したが、応募件数としてはあまり多くなかった。一方、水素やアンモニア、水素含有物質の新規な製造法や新規触媒など、興味ある発想に基づいている提案が多くみられた。また、2013 年度の実験提案はエネルギーキャリアあるいは水素の製造、利用に関する研究提案がほとんどで、エネルギーキャリアを取り巻くシステムや輸送、安全といった提案はなかったので、次回以降歓迎するという旨を、総括総評としてさきがけホームページ上で発信した。

2013 年度は新規研究領域ということもあり、準備期間が短かったために、チーム編成や提案の吟味が十分できていなかった可能性もあると考えられる。しかし、結果的にはアンモニアやそれ以外のエネルギーキャリア以外の応募が採択され、この分野の裾野の拡大に結びつく、独創的な研究課題を採択できたものと期待された。

<2014 年度>

2014 年度は 15 件の応募があり、10 件の面接選考を経て、最終的に 3 件の研究提案を採択した。

本年度は 2 回目の公募ということで、十分な提案の準備検討が盛り込まれている提案や、アンモニアや有機ハイドライドだけでなく、新規なエネルギーキャリアの提案もいくつか

見られた。全体的には応募件数はあまり多くなかったが、水素やアンモニア、水素含有物質の新規な製造法や新規触媒、分離技術など、興味ある発想にもとづく提案がみられた。選考過程において、本研究領域の守備範囲やエネルギーキャリアとしての出口や実現性が、革新性、新規性ととともに多く議論され、慎重に選択・順位付けを進めた。

2014年度はエネルギーキャリアや新規な合成手法、新規な反応システムや分離技術手法などエネルギーキャリア分野の発展に結び付く、独創的な研究課題が採択できたと考えている。

<2015年度>

2015年度の公募では、光触媒反応、バイオ燃料・化石燃料の高効率利用などのエネルギーキャリア研究との境界領域とみなせるものまで募集の範囲を拡大した。その結果、前年度より多い21件の応募があり、9件の面接選考を経て、最終的に3件の研究提案を採択した。

本年度は3回目の募集となり、十分な提案の準備や検討がなされている提案が多く見られた。水素やアンモニア、水素含有物質の新規な製造法や新規触媒、分離技術などから、新規なエネルギーキャリアの提案や光化学反応との境界領域などまで、多様な分野の興味ある発想にもとづく提案があった。

2015年度は新規なエネルギーキャリア物質の提案や、新規な合成手法、高効率な利用システムなどエネルギーキャリア分野の発展に結び付く、独創的な研究課題を採択できたものと考えている。

③選考結果のまとめ

3年間にわたって、9件の多彩な研究課題を採択した。研究課題名は下記の通りである。

- 1) エネルギーキャリアとしてのアンモニアを合成・分解するための特殊反応場の構築に関する基盤技術の創成
- 2) ギ酸の脱水素化反応による高圧水素の高効率製造技術の開発
- 3) 新規固体酸化物形共電解反応セルを用いた革新的エネルギーキャリア合成技術(キャリアファーム共電解技術)の開発
- 4) 固体電解質を用いた電解セルの電極触媒高性能化によるアンモニア合成システムの開発
- 5) 再生可能エネルギー利用による水素製造とエネルギーキャリアとしてのメタン製造技術の研究
- 6) バナジウム系合金膜による次世代エネルギーキャリアからの革新的水素分離・精製基盤技術の創出
- 7) 分子触媒を利用した革新的アンモニア合成及び関連反応の開発
- 8) ナノハイブリッド材料創製に基づくクリーンアルコール合成システムのデザイン

と構築

9) 液体燃料直接型固体アルカリ燃料電池用触媒層およびMEA 基盤技術の構築

(3) 複合領域として

上記の研究課題をエネルギーキャリアの種類、および開発対象となる技術で分類すると次の図の通りになる。



4. 領域アドバイザーについて

本 CREST・さきがけとも共通の観点からの視野が必要であり、また複合領域としての相互の連携の必要性から、同じメンバーで領域アドバイザーに就任いただいた。エネルギーキャリアは材料、化学、化学工学、機械、電気、システムなどの複合領域であり、さらには学術的な重要性のみならずエネルギーへの量的貢献や将来展望などに対する観点からの判断も必要となることから、全体としてそれらの領域を包含する学問分野の大学、企業、研究所から第一線の研究者の中から人選し、就任依頼した。また、サイトビジットをはじめ合同で開催する検討会、領域会議、評価会、及び個別研究課題議論に際しては、領域アドバイザーにも参画の協力を依頼した。大学関係 5 名(のちに 4 名)、研究機関 2 名、企業関係者 3 名が領域アドバイザーを構成し、研究の視点に加えて産業化へのつながりの視点も含めて、アドバイス・評価を行った。

領域アドバイザーの具体的な専門分野は、秋鹿アドバイザーがアンモニアを始めとする触媒である。岡田アドバイザーは触媒・化学工学が現在の専門ではあるが、以前は燃料電池が専門である。酒井アドバイザーも専門は燃料電池であるが、現在は研究管理に従事している。村田アドバイザーはエネルギーキャリアを始めとする、エネルギー経済性評価、堤アドバイザーは熱力学やシステム評価の第一人者である。出来アドバイザーは電気化学全般、増田アドバイザーは触媒・化学工学の専門家である。松本アドバイザーは燃料電池を始めとするエネルギーシステムに関する専門家であり、水野アドバイザーは触媒・化学工学が専門である。以上のように、幅広いエネルギーキャリアの科学領域に対して、産学両方から専門的に一流のアドバイスができる布陣となっている。

また、秋鹿アドバイザーは 2014 年度より SIP「エネルギーキャリア」のサブプログラムディレクターに着任し、同プログラムとの間での情報交換が積極的になされている。

なお、山内美穂教授は 2015 年 3 月をもって領域アドバイザーを退任した。

氏名	現在の所属	役職	専門分野	任期
秋鹿 研一	東京工業大学	名誉教授	化学環境学、環境化学プロセス、触媒化学、物理化学	2013 年 6 月～ 2021 年 3 月
岡田 佳巳	千代田化工建設 (株) 技術開発ユニット/水素チェーン事業推進ユニット	技師長	化学工学、電気化学、触媒化学	2013 年 6 月～ 2021 年 3 月

酒井 夏子	産業技術総合研究所 産学官・国際連携推 進部	部長	固体無機化学、電 気化学	2013年6月～ 2021年3月
堤 敦司	東京大学 生産技術 研究所	特任教授	エネルギープロセ ス工学、化学工 学、微粒子工学、 流動工学	2013年6月～ 2021年3月
出来 成人	神戸大学	名誉教授	無機材料化学、電 気化学、界面化 学、溶液化学	2013年6月～ 2021年3月
増田 隆夫	北海道大学 大学院 工学研究院	教授	触媒反応工学	2013年6月～ 2021年3月
松本 信一	トヨタ自動車(株) 未来創生センター	プロフェッショ ナルパートナー	エンジン燃焼・後 処理技術、燃料電 池発電システム	2013年6月～ 2021年3月
水野 雅彦	住友化学(株) 石 油化学品研究所	上席研究員	触媒化学	2013年6月～ 2021年3月
村田 謙二	(一財) エネルギー 総合工学研究所 プ ロジェクト試験研究 部	参事	燃料電池、二次電 池、水素エネルギ ー	2013年6月～ 2021年3月
山内 美穂	九州大学 カーボン ニュートラル・エネ ルギー国際研究所	教授	燃料電池、触媒化 学	2013年6月～ 2015年3月

5. 研究領域の運営について

研究総括の研究領域運営方針について

本研究領域の研究は学術的価値と出口イメージの両面から常に評価され、両面での成功を求められる。学術的価値の創出は最も重要な面であり、単に既存技術を組み合わせたものや、予想される結果を埋めていく研究は CREST・さきがけにはふさわしくない。その観点からそれぞれの研究課題において、高い目標を設定して新たな学問や新規な材料、新規なデバイスの創成に繋がるようレベルの高い研究をお願いした。一方で本研究領域はエネルギーキャリアの看板を掲げていることから、単に新規性、革新性だけで評価されるのではなく、エネルギーシステムの中で有効な可能性を持つよう、実際上の出口イメージを持ってもらうこともお願いした。これは量的生産性の可能性はエネルギー収支での有効性の観点からの評価である。しばしば、大学の研究者や研究所研究員はそのような視点で研究方針や研究結果を判断する経験が不足している場合もあり、領域会議などにおいて常に意識するよう指導した。

研究領域のマネジメントについて

研究領域がバーチャル・ネットワーク型研究所として機能し、しかも CREST・さきがけ複合領域として効果的に働くよう、研究チーム構成メンバー、さきがけ研究者、総括、アドバイザーらが様々な専門性と経験から自由にそれぞれの研究課題に対して意見を述べられるような環境を作るよう配慮した。アドバイザーは CREST・さきがけで進行している研究課題を広く見渡せるよう共通のメンバーにお願いし、大学、研究所、企業のそれぞれの観点から自由に発言いただいた。チームや研究者らはそれら異なる視点からの複数のアドバイスの中から自身の判断や総括との打ち合わせによって方針を決定し、しばしば当初の方針から軌道修正することも可能とした。さらに CREST とさきがけの研究者間の情報交換も奨励し、その結果さきがけ研究者間、CREST・さきがけをまたぐ研究会や共同研究なども進められた。さらに国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) や SIP のエネルギーキャリアに関連する課題とも情報交換の機会を設けたことによって、それらとの共同研究に進んだ例もある。

(1) さきがけ

① サイトビジット

研究総括、およびアドバイザーが、各さきがけ研究者に対し 2 回ずつサイトビジットを実施した。1 回目のサイトビジットは採択年度の第三四半期に実施した。研究環境の視察のみならず、所属上長への、さきがけ事業趣旨説明を実施し、円滑な運営への準備を行った。2 回目のサイトビジットは第 3 年次の第一四半期に実施した。主にさきがけ予算によって購入した機器・設備等について視察し、安全面の確認・予算運営等の基本的情報の取得および課題進捗状況に対する指導を行った。

②さきがけ研究進捗検討会議

さきがけ研究者に対しては、研究課題の達成はもとより、異なる専門分野や視点からアドバイスを与えることにより、視野を広げるとともに個人で研究方針を決定しつつも、新たな方向性の出口にも導くことを重視した。さきがけ研究者の研究進捗について細やかに把握・指導するため、年2回のさきがけ進捗検討会とCRESTと共同開催の年2回の領域会議で議論を行い、必要な場合には研究方針見直しを行うとともに、研究者として育成することを重視した。検討会、領域会議の多くは合宿形式とし、エネルギーキャリアに関する大学、研究所、企業の見学会も多く開催した。年2回の領域会議ではCRESTと合同で行うことで、CRESTのテーマを知るとともに、研究総括や領域アドバイザーからだけでなくCREST研究者からも幅広く指導情報提供を受ける機会を持った。また、これらの領域会議では、会議中の議論、アドバイスに加えて、各領域アドバイザーからのコメントを文書で各研究者に提供することで、研究の進め方への指導を行った。さきがけ研究進捗検討会議の実績は下記の通りである。

第1回：2014年4月25日(金)

見学地：京都大学 江口研究室

第2回：2014年10月20日(月)

見学地：なし

第3回：2015年6月9日(火)～10日(水)

見学地：昭和電工株式会社 川崎事業所

第4回：2015年11月20日(金)～21日(土)

見学地：国立研究開発法人物質・材料研究機構、国立研究開発法人産業技術総合研究所

第5回：2016年6月28日(火)～29日(水)

見学地：田中貴金属工業株式会社 湘南工場

第6回：2016年12月13日(火)

見学地：なし

※1期生の事後評価会を兼ねて実施

第7回：2017年5月29日(月)～30日(火)

見学地：東北大学 流体科学研究所 小林研究室、丸田・中村研究室

第8回：2017年11月28日(火)～29日(水)

見学地：なし

※2期生の事後評価会を兼ねて実施

第9回：2018年4月20日(金)～21日(土)(予定)

見学地：太陽日酸株式会社 山梨事業所

③研究費の配分

各研究課題への研究費の配分額は「1. 研究の概要(4)採択課題・研究費」に記載のとおりである。研究費の見直し・増額について下記に詳細を述べる。

合同領域会議・進捗検討会議での研究進捗報告に基づき、研究の加速が期待できる研究課題に対して、適宜増額措置を行っている。また、2016年4月に日隈研究者の所属する熊本大学が地震によって被災した際は、故障した物品修理のための増額措置を行い、研究計画の遂行に支障がないよう措置した。

また、エネルギーキャリアを生産・利用する新規システムを開発するためには、さきがけ研究者の持つ各要素技術同士の連携が重要である。そのため、領域内外のさきがけ研究者間の共同研究も積極的に推進しており、成果の期待できる研究課題に対しこれまで増額措置を行っている。

実績は下記の通りである。

研究者氏名	年月	支援金額 (千円)	支援内容
青木 芳尚	2015年12月	4,300	FRA付きポテンシostat・セラミックス高温電気化学セル購入
日隈 聡士	2016年10月	350	熊本震災によって故障した物品修理
	2016年10月	500	さきがけ内共同研究に使用するXAFS測定用物品・消耗品
小林 洋治	2015年7月	1,600	IR用高圧対応拡散反射セル・真空ライン購入
	2016年6月	3,500	高圧反応ライン増設
白石 康浩	2015年12月	2,592	示差熱・熱量測定装置購入
	2017年5月	1,000	さきがけ内共同研究に使用するアンモニア合成光触媒開発用消耗品購入
辻口 拓也	2015年7月	3,000	ドラフトチャンパー式購入
	2017年5月	1,000	さきがけ内共同研究に使用するギ酸燃料電池開発用消耗品購入
脇坂 暢	2017年1月	3,400	ポテンシostat式購入
伊藤 良一	2017年5月	1,000	さきがけ内共同研究に使用するグラフェン触媒担体開発用消耗品購入
	2017年8月	1,400	電気炉一式購入
	2017年10月	1,000	さきがけ内共同研究に使用する化学ドーピンググラフェン作成用消耗品購入
橋本 望	2017年10月	1,000	さきがけ内共同研究に使用する微小固体燃料供給装置製作用消耗品購入・旅費
森 浩亮	2017年5月	1,000	さきがけ内共同研究に使用するギ酸分解触媒開発用消耗品・加圧反応容器購入
	2017年8月	2,650	島津製GC-2014一式・分析用ガス購入
嶺岸 耕	2017年5月	1,950	電気化学インピーダンス測定装置購入

④人材育成

3章でも述べたように、本研究領域はエネルギーキャリア研究分野を強力に率いる次世代の人材育成も大きな任務である。

採択後、1期生の中村研究者が東北大学助教から准教授に、3期生の伊藤研究者が東北大学助教から筑波大学准教授に昇任している。また、1期生の日隈研究者は京都大学特定助教から熊本大学助教に、脇坂研究者が山梨大学特任准教授から富山県立大学准教授に昇任し、任期なしの職を得ている。また、後述するように、本さきがけの成果により未来社会創造事業やさきがけネットワーク※3への採択など、後続ファンドの獲得にも至っている。

さきがけ研究課題の中で継続的な指導が必要と判断したものに関しては、研究者自身の自主性、発想を十分に尊重しつつ、総括または専門に応じた特定の領域アドバイザーによる

「マンツーマン」によるサポートも実施している。

※3 さきがけネットワーク

さきがけ研究の実施やさきがけ研究者間の交流を契機として生まれた、挑戦的な研究構想の実現可能性を検証する取り組み。さきがけ研究者を対象とし、研究期間約1年半、研究費は2,000万円(直接経費)を上限、共同研究者としてさきがけ研究者(終了1年以内の研究者も対象に含む)1名以上の参加を条件としている。

詳細は下記を参照。

http://www.jst.go.jp/kisoken/presto/research/sakigake_nw/index.html

(2) CREST

① チーム会議・サイトビジット

課題中間評価チーム以外の各チームは、毎年少なくとも1回ずつのチーム研究進捗報告会かサイトビジットを実施、さらにチーム内での報告会などを開催している。研究総括として、サイトビジットには必ず出席して進捗情報の把握、推進方針へのアドバイスをを行った。さらに、領域アドバイザーにも参加を呼び掛け、毎回、数名程度のアドバイザーの参加を得て、専門性の高い内容の議論を研究代表者以外のチーム研究者と直接と議論し、領域内、領域外、産業界との情報交換、連携研究に向けた取り組みなど、適切なアドバイスを行ってもらった。サイトビジットにおいては、CREST予算で購入した装置類の活用状況の確認も行った。

CRESTの各研究チームで開催する個別の打ち合わせ研究会には、チームからの出席要請に応じて、総括及びアドバイザーは可能な場合には出席し、研究の進捗状況や研究環境上の課題等の把握に努めた。

② 研究費の配分

研究開始後、年度毎に研究計画および研究費の見直しと共に増額要求等の提出を求め、主に研究領域内の総括裁量経費から必要に応じて、重点配分などを行ってきた。主な重点配分措置(3,000千円以上)の案件は次の表の通りである。

全般的には、永岡チーム、姫田チーム、西村チームへの増額案件と合計金額が多いが、これらのチームは研究成果も順調であり、課題中間評価でも他のチームに比較して、良い評価となっている(表中では中間評価結果による、増額を*)で示した)。

永岡チームの杉本グループには熊本地震(2016年4月)による震災被害があった。床下に落下した計算機が上の階からの水に浸り、使用できなくなった。JSTの震災復興予算を利用し、早期の対応を図った。増額支援により、アンモニア触媒上に配位した窒素に水素が反応していく様子が計算により表現できるようになってきた。

西林チームは学部内学科の移動に伴い、場所の変更が必要となり、CREST研究のための設

備を新設する増額を実施した。

増額案件の一覧表(3,000千円以上の案件)

代表者氏名	年月	支援金額 (千円)	支援内容
永岡 勝俊	2014年7月	12,000	高精度ガス吸着量測定装置の購入
	2014年7月	6,500	2色式熱画像計測システムの購入 (500℃以上での測定が可能)
	2015年7月	16,000	赤外分光装置一式
	2015年7月	10,000	タイトバインディング分子動力学計算システムの購入
	2016年6月	4,730	熊本地震支援 (杉本グループ計算機購入)
	2016年7月	16,000	多目的化学吸着量脱離量測定装置一式の購入
	2016年11月	3,600	シュミレーション用計算機一式とライセンス費など*)
	2016年11月	6,400	マテリアルズ・インフォマティクス用開発環境ソフトウェアの購入*)
	2017年10月	4,000	断熱型熱量計用特注容器一式
姫田 雄一郎	2014年7月	6,000	オンラインマイクロGC
	2015年7月	3,500	試料吹付低温装置
	2015年7月	5,000	オンラインガスクロ
	2015年7月	3,000	高圧NMRセル一式 (保護ケース含む)
	2016年7月	8,000	反応装置の高圧仕様化 (改造)
	2016年7月	4,000	高速液体クロマトグラフィーの購入
	2016年11月	10,000	EasyMax102Advanced 反応熱量測定装置*)
	2017年10月	9,000	In Situ FT-IR装置の購入および設置費用
藤代 芳伸	2015年7月	3,024	FT-IR用真空加熱型拡散反射測定装置一式
西村 睦	2015年7月	15,000	X線2次元検出器
	2015年7月	6,480	断面試料作製装置一式
	2016年7月	3,500	雰囲気中引張試験装置のヒーター改造
	2017年11月	19,872	アークプラズマ法ナノ薄膜蒸着装置の購入*)
西林 仁昭	2016年7月	10,000	卓上フード/実験設備の購入
	2016年7月	6,750	実験室の借用(1回のみ支援)

③人材育成

CREST では、西林研究代表者と山内研究代表者が 2015 年に採択後、准教授から教授に昇任した。藤代研究代表者は、産業技術総合研究所材料・化学領域研究戦略部の研究企画室室長に西村研究代表者は物質・材料研究機構経営企画部門の部門長に昇任した。

(3) 複合領域として/共通事項

① 合同領域会議

研究進捗の報告・検討の場として、年 2 回の領域会議を CREST・さきがけ合同で開催している。出席者は研究総括、領域アドバイザー、CREST 研究代表者、主たる共同研究者、研究参加者、さきがけ研究者と多数の研究参加者の出席を求め、情報交換の機会としつつ、深い議論につながることを期待した。これらの領域会議では、会議中の議論、アドバイスに加えて、各領域アドバイザーからのコメントを文書で各研究者に提供することで、研究の進め方への指導を行った。領域関係者間での交流・情報交換を促進するために、毎回懇親会(意見交換会)を実施し、さきがけで特徴的な合宿形式の会議を CREST も巻き込んで進め、各層で

の議論の促進を図った。

また、会議のスケジュールにはなるべく企業見学の時間を設けて、エネルギーキャリアの製造プラントや触媒製造工場など、再生可能エネルギー関連技術を扱う施設見学を実施した。多くの企業見学を通じ、工場での大量製造過程・スケールアップの手法、製造コストなどについて研究者に実感してもらうことで、社会実装への意識付けを行う目的のもと実施した。

領域会議の実績は下記の通りである。

第1回：2014年1月15日(水)～16日(木) 出席者：約30名

見学地：千代田化工建設株式会社 子安オフィス・リサーチパーク

第2回：2014年7月30日(水)～31日(木)出席者：約20名

見学地：三井化学株式会社 大阪工場

第3回：2015年2月21日(土)～23日(月)出席者：約20名

見学地：クラリアント触媒株式会社 富山工場

第4回：2015年8月26日(水)～27日(木)出席者：約50名

見学地：国立研究開発法人産業技術総合研究所 福島再生可能エネルギー研究所(FREA)

第5回：2016年2月20日(土)～22日(月)出席者：約60名

見学地：三井化学株式会社 岩国大竹工場

第6回：2016年9月25日(日)～27日(火)出席者：約70名

見学地：株式会社東芝 水素エネルギー研究開発センター

第7回：2017年2月15日(水)～16日(木)出席者：約70名

見学地：なし

第8回：2017年9月25日(月)～26日(火)出席者：約70名

見学地：岩谷産業株式会社 中央研究所

第9回：2018年1月26日(金)～27日(土)(予定)

見学地：なし

②特許申請とプレスリリース

本研究領域としては、権利化の必要な成果は特許申請することを推奨している。各さきがけ研究者およびCREST研究チームは企業領域アドバイザーからの助言などを基に、特許申請に積極的に取り組んでいる。

研究成果の適切な知的財産化を促す目的の下、JSTの知財関連部署から講師を招き、第1回および第8回領域会議にて知的財産講習会を実施した。領域開始時に知財講習会を開催することは戦略的創造研究推進事業では多いが、領域の途中で知財講習会を開催した領域例は少ない。実際、講習会直後にさきがけ研究者から相談が寄せられ、大学で不承継となった発明がJSTから特許出願されるケースがあった。

また、領域会議や課題中間・事後評価会に産学連携展開部および知的財産マネジメント部の担当者を招き、CREST・さきがけ研究の成果展開について意見交換を実施している。

所属研究機関で出願しなかった特許について、所属研究機関から JST に譲渡を頂き、JST から出願に取り組んでいる。さきがけの成果からは国内出願 2 件、PCT 出願 1 件がなされている。また、所属研究機関で国内出願したものの、国際出願を実施しなかった特許についても譲渡をいただき、PCT 出願を実施している。CREST からは永岡チーム 2 件、山内チーム 1 件の PCT 特許を JST から出願した。

また、プレスリリースにも積極的に対応するように、研究代表者・研究者へ指導している。既に 5 件については、JST との共同プレスリリースとして発表しており、その詳細資料を添付したが、案件としては次の通りである。

(i) 永岡チーム 2016 年 9 月 21 日

「世界最高レベルの性能を持つアンモニア合成触媒を開発—金属の特殊な積層構造と塩基性酸化物の相乗作用」

(ii) 永岡チーム 2017 年 4 月 29 日

「アンモニアから水素を簡単に取り出す触媒プロセスを開発～触媒への吸着熱を利用した新しい反応の起動方法～」

(iii) 姫田チーム 2015 年 12 月 11 日

圧縮機を使わない高圧水素連続供給法を開発

「ギ酸を用いたコンパクトな水素ステーション構築に向けて」

(iv) 西林チーム 2017 年 4 月 4 日

「世界最高の活性を示すアンモニア合成触媒の開発に成功～モリブデン錯体を触媒とした常温・常圧での窒素固定反応～」

(v) 山内チーム 2017 年 12 月 13 日

「世界初、電力のみを使ってシュウ酸からグリコール酸を連続的に合成する装置の開発に成功—貯蔵や輸送が容易な次世代燃料の実用化に期待—」

③成果の一般公開

CREST・さきがけ研究で得られた成果を将来的な社会実装に繋げていく上で、研究成果の外部発表は重要である。本研究領域では下記のような展示会で成果発表を行い、領域の宣伝および共同研究先となりうる企業の探索を行っている。また、学会とは異なる場での成果発表について経験を積んでもらう、他ブースの見学を通じて企業での研究開発動向を学んでもらう、という意図のもと、発表は主にさきがけ研究者または CREST の若い研究参加者に依頼している。

(i) 再生可能エネルギー世界展示会

再生可能エネルギー世界展示会は、再生可能エネルギーをはじめ、エネルギーと環境の全

分野において、地球環境保全に貢献する製品・技術・サービス・周辺機器・情報を展示する日本最大の展示会である。

本研究領域はSIP「エネルギーキャリア」と共に、2014年度から現在までに4回ブースを出展し、本研究領域事業の広報およびCRESTにおける研究成果の発表を実施した。

(ii) nanotech 国際ナノテクノロジー総合展・技術会議

nanotech は国内最大規模のナノテク分野の展示会であり、研究開発や製品開発等、R&D 関係部署からの来場者が約 50%を占めている。

2016年度は、さきがけ1期生の成果報告会、および企業関係者への成果宣伝の場として、JST 出展ブース内にてポスター発表・および口頭プレゼンを実施し、産業界に向けて成果を発信した。2017年度もさきがけ2期生が同様に成果報告を実施する予定である。

④他のエネルギーキャリア関連事業との連携

エネルギーキャリア関係のプロジェクトを持つ他機関との連携も積極的に実施した。本研究領域の江口総括はSIP「エネルギーキャリア」の課題において研究責任者を務めている。総括がSIP内の会議でCREST・さきがけの活動紹介をしたことがきっかけとなり、SIPとNEDOが合同で実施する情報意見交換会(非公開)に第3回から参画することとなった。CREST・さきがけの研究者から希望者を募りポスター発表を実施した。SIP-NEDO 情報意見交換会でのポスター発表状況は次の通りである。

第3回：2016年8月3日(火)CREST3件、さきがけ2件

第4回：2017年3月28日(火)CREST5件、さきがけ2件

第5回：2018年2月8日(木)(参画予定)

⑤共同研究の推進

ここでは、研究領域内外共同研究、国際連携および産業界との連携について述べる。

(i) 研究領域内共同研究の推進

バーチャル・ネットワーク型ラボの特徴を最大限に生かすために、研究領域内各チーム間の共同研究を推奨してきた。

● さきがけ研究者間での連携例

- ・青木研究者・日隈研究者：青木研究者が提案した研究課題「実用的中温動作型水素膜燃料電池の開発」が、2017年度JST 未来社会創造事業(探索加速型)に採択された(応募倍率:12.6倍)。また本研究課題には同じくさきがけ1期生の日隈研究者が参画している。エネルギーキャリア領域での研究活動を通じて得られた成果および人的ネットワークが、次なる大型ファンドに繋がった例である。

- ・協坂研究者・伊藤研究者：KOH 溶液中でのポーラス Ni 電極の水素発生能に関する共同研究を実施し、成果は共著論文として発表された。

●CREST 研究者間での連携例

- ・曾根チームの松本グループでは、150°C程度でのプロトン伝導体を探索しているが、その候補材料として、里川チームから各種の耐水熱性ゼオライトの提供、山内チームから界面イオン伝導性ナノ粒子の提供してもらい、その特性を評価して共同研究を進めている。その研究成果については、各1報の論文を投稿中である。

●CREST・さきがけ研究者間での連携例

- ・アンモニアに関する研究課題を実施している領域関係者が有志で「アンモニア合成・利用研究会」を立ち上げ、成果の共有および意見交換の場を設けている。これまでに3回開催され、CREST 永岡チーム、里川チームおよびさきがけ日隈研究者、小林研究者が参加している。
- ・CREST 曾根チームの主たる共同研究者である阿部孝之教授とさきがけ協坂研究者が、バレルスパッタ法による Ti 担体 Pt 触媒の調製という内容での共同研究を開始した。本研究は富山大学水素同位体科学研究センターにおける一般共同研究課題として採択された。

(ii) 研究領域外共同研究の推進

●他の CREST またはさきがけ研究領域との研究連携

- ・さきがけ研究領域「相界面」の研究者(代表：井上元研究者)と本研究領域の辻口研究者の共同研究提案が、さきがけネットワークに採択(研究費総額 20,000 千円、うち辻口研究者配分額 5,000 千円/1.5 年)され、12 月より研究開始となった。本研究課題はギ酸燃料電池を題材とし、多孔質電極内部の物質移動という観点から性能向上を目指すもので、辻口研究者のさきがけ研究での知見が土台となっている。
- ・さきがけ研究領域「相界面」の狩野旬研究者と本研究領域の日隈研究者の共同研究が、SPring-8 XAFS 実験課題(Proposal No. 2014B1516, 2015B1463)として採択された。
- ・永岡チームは CREST 研究領域「革新的触媒」の松村チーム(九州大学超顕微解析研究センター 松村晶教授)と超高分解能 STEM-EDX によるアンモニア合成・分解触媒の構造解析で、2013 年 10 月から共同で研究を進め、2 報の論文を報告した。

●国際連携

- ・姫田チーム・姫田グループは、2008 年からブルックヘブン国立研究所(米)、藤田恵津子シニアケミストと共同研究を進めており、DFT 計算によるギ酸脱水素化反応の反応解析では論文 1 報を発表している。また、2014 年から大連理工大学(中国)、王万輝副教

授と有機物からの水素発生について共同研究を進めている。

- ・ 姫田チーム・川波グループでは、キングアブドラ科学技術大学(サウジアラビア)、触媒センター、Kuo-Wei Huang 准教授と 2016 年以降、ギ酸脱水素化触媒の開発で共同研究し、論文 1 報を既に報告している。
- ・ 山口チームでは、2015 年 10 月から Council of Scientific & Industrial Research-National Institute for Interdisciplinary Science and Technology (CSIR-NIIST, India)、Materials Science and Technology Division の U. S. Hareesh 教授と新規エネルギー材料の開発で共同研究を進めており、既に論文 2 件を発表している。本年度、JST の研究者招聘支援制度を利用して、インド National Institute for Interdisciplinary Science and Technology の Sankar Sasidharan 主任研究員が 9 ヶ月間滞在して共同研究を進めている。

● 産業界との連携

- ・ 姫田チームでは、A 企業に不要物となるギ酸の除去向けとして、触媒を有償で試料提供している。また、B 企業とは固定化触媒開発で 2017 年以降に秘密保持契約を締結している。
- ・ 曾根チームの松本グループでは京セラ(株)が連携企業として参画し、特許を出願している(特願 2016-214586、名称「水電解／燃料電池発電用セル及びこれを複数積層したセル積層体」、出願日 2016/11/01)。
- ・ 山口チームでは、C 社とカプセル触媒に関する研究で 2017 年 9 月に共同研究契約締結済みで、現在共同研究を実施中である。

6. 研究の経過と所見

(1) さきがけ

① 研究総括の狙いに対する研究の状況

さきがけはエネルギーキャリアに関連する最も萌芽的、革新的な研究の展開が可能な領域であると位置づけられる。そのため新規な着想に基づく新たなエネルギーキャリア物質の提案と諸特性、水素貯蔵物質の新規な合成法、新しい着想に基づく利用法、エネルギーキャリア物質の反応解析などチャレンジングな提案を採択した。一方で、多くの採択テーマで、研究の推進が順調に進まずに、難局や問題に遭遇することが多くみられた。そのような時でも総括やアドバイザーらの適切な助言により、研究方向の軌道修正を行いながらも着実に研究が推進された。これは一つにはエネルギーキャリアは複合的な領域であるため、採択研究者の専門分野だけではなく、多面的な視点から評価して推進することが求められるためである。

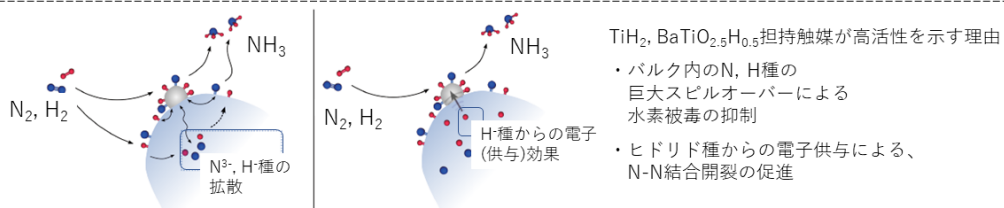
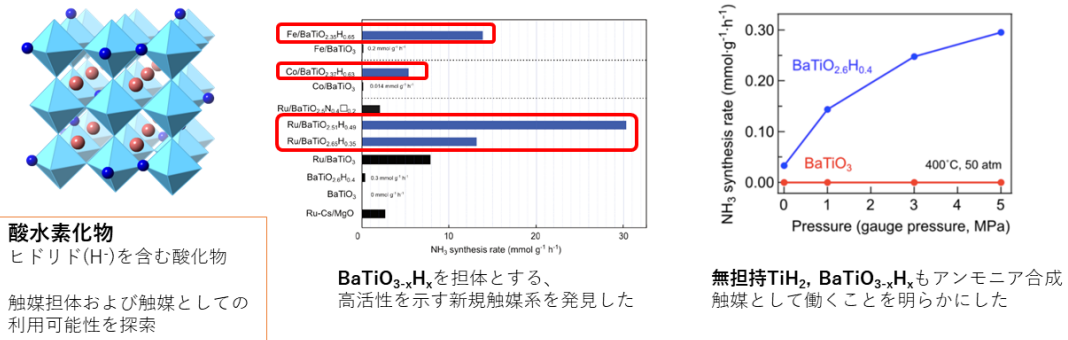
② 科学技術進歩への貢献

さきがけ 12 研究者の論文発表件数は 68 件(国際 60 件、国内 8 件)であり、口頭発表は 184 件(内、招待講演は 56 件)であった。

本研究領域の特筆すべき成果として、触媒、光触媒に関する研究課題において、いくつかの新規性の高い、高活性なものが見出されたことが挙げられる。

小林研究者が開拓したアンモニア合成触媒としての Ru 担持酸水素化物は、全く新規な触媒系でありながら従来の触媒に匹敵する高活性を持っており、今後新しい触媒群への展開が期待されるという点で重要である。加えて、小林研究者はチタン系水素化物(BaTiO_3 , TiH_2)が遷移金属を担持することなくアンモニア合成の触媒作用を示すことも発見しており、従来の系と異なるメカニズムで触媒反応が起こることが示唆された。Ru 等の担持行程を必要としない、安価で調製が簡便な触媒の開発に繋がらうという点でも、注目に値する。

酸水素化物による新しいアンモニア合成触媒(京大・小林)



白石研究者は過酸化水素合成活性を示す新規光触媒を開発している。過酸化水素の合成はエネルギー消費型の反応であるため、光触媒を用い水と酸素からの合成を実現したことは注目に値する。ピロメリト酸ジイミドをドーピングしたグラファイト状窒化炭素をグラフェンと複合させた光触媒は、0.20%という粉末光触媒による人工光合成系において最高の変換効率を記録している。本成果は2016年にアメリカ化学会誌にて論文として発表され、現在までの被引用数は36件であり、Top1%論文である(2017年12月、Scopus調べ)。また、同じく白石研究者が開発したレゾルシンフェノール(RF)樹脂触媒も過酸化水素の合成に活性を示す新規な光触媒系であり、現在までに1%を超える光量子効率を達成している(特許出願済み、論文未発表)。

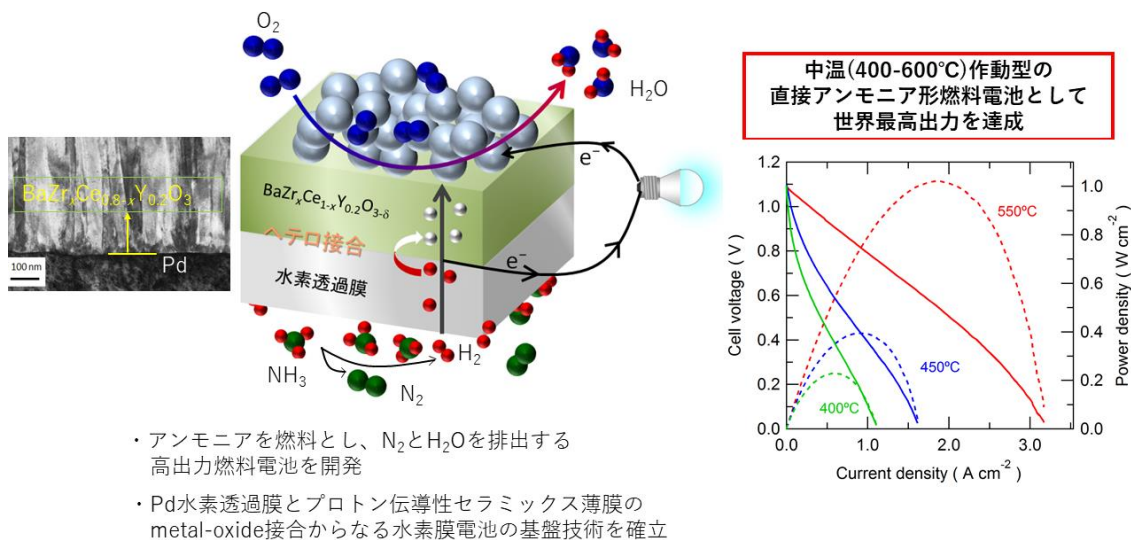
その他ギ酸分解触媒、ギ酸合成触媒やアンモニア燃焼触媒でも、新規な触媒系を提案することができており、本研究領域が大きな学術的貢献をなしている。

③科学技術イノベーションへの貢献

本研究領域ではアンモニア燃焼、アンモニア合成などアンモニアを取り巻く触媒反応や新規デバイスを扱う研究者、チームが多い。これらの研究者、チームは緊密に情報交換を行っており、燃料・エネルギーキャリアとしてのアンモニア研究において、本研究領域は大きな貢献をしている。中でも、青木研究者は新規な発想に基づくアンモニア燃料電池の発電を実現し、従来にない高出力を低温でも達成することに成功した。従来のアンモニア形燃料電池のピーク出力密度の最高値が600°Cで0.4 Wcm⁻²程度であるのに対し、550°Cにて1.0 Wcm⁻²、また450°Cでも0.4 Wcm⁻²の値を示しており、より低い温度で効率よく作動することが明らかとなった。さらに水素分離型燃料電池における動作時の欠陥生成に基づく伝導機構な

ども明らかにしており、将来の新たな方向性と固体イオクス分野での学術的發展に寄与するものとして期待される。

中温領域で作動する直接アンモニア形水素膜燃料電池の創製 (北大・青木)



また、ギ酸は安定で溶液として貯蔵しやすく、容易に水素に変換でき燃料としても利用できるためエネルギーキャリアとしての性質に優れているが、ギ酸をエネルギーキャリアとして利用するための技術開発は遅れていた。辻口研究者は、直接ギ酸形燃料電池に利用可能な高活性・高担持触媒の開発や、数値解析を用いた電極内部の物質移動の可視化に取り組み、電極の設計指針を得ることに成功している。高出力な直接ギ酸形燃料電池を開発する上で重要な知見となると考えられる。また、森研究者は従来の10倍以上の活性を示すギ酸分解不均一触媒の開発に成功し、本触媒が二酸化炭素からのギ酸の合成にも有効である両機能性触媒として働くことも明らかとした。また、理論計算を通じて、ギ酸合成触媒を高活性化するための設計指針も示している。これらの成果を通じ、ギ酸のエネルギーキャリアとして合成・利用する技術の有効性を、後述するCREST 姫田チームの研究成果とともに明確に示すことができたと考えている。

④顕彰、受賞

現在のところさきがけ研究者のうち、大木研究者、中村研究者、日隈研究者、白石研究者、脇坂研究者、伊藤研究者、橋本研究者、森研究者が学会等から賞を授与された。この内、中村研究者、伊藤研究者はそれぞれ2016、2017年度の科学技術分野の文部科学大臣表彰若手科学者賞を受賞した。伊藤研究者は王立イギリス化学会からPCCP Prize(国際賞)を受賞した。

⑤進捗が思わしくない事象、懸念事項

第1期の大木研究者については穏和な条件下でのアンモニアの錯体触媒による合成を目的とし、アンモニアの生成までは成功したものの、触媒的に大量に合成できる段階までは至らなかった。同様の研究課題については、本研究領域 CREST の西林チームではアンモニアの錯体触媒による合成に成功し、世界的にも注目される研究となっている。大木研究者の合成した錯体においては、極めて反応性の高い触媒が錯体の不安定性に結びつくという性質によることが明らかとなった。一方で、得られた新規な錯体群は反応性、構造とも注目されるもので学術的には評価されるものである。

第3期の橋本研究者はアンモニア、微粉炭混焼火炎の観察から燃焼機構を解析することを目的としているが、アンモニア、微粉炭それぞれの燃焼火炎の観察には成功したものの、混焼火炎の観察には成功していない。シュリーレン光学系による観察を試みたが、それぞれの火炎の輝度が異なるために観察が不可能で、ラジカル時発行観察に工学系を切り替えて検討するよう方針変更した。

⑥今後の期待や展望

さきがけ研究は提案時当初の研究の方向とは軌道修正した研究課題も多いが総じて興味ある成果が得られており、エネルギーキャリア研究の分野としての枠内で新規性、学術性を発揮できる成果に結びつきつつある。また研究者についても総括やアドバイザー、領域内他研究者との情報交換により最適な方向の研究方針が設定され、多面的な思考の重要性を理解したものと信じる。研究者としての人材育成に大きな効果があったものと期待しており、今後それぞれの専門領域で実力を伸ばしてもらえるものと考えている。

各研究課題の経過と研究総括の所見については下記の通りである。

<2013年度採択>

青木 研究者

アンモニアは将来、燃料やエネルギーキャリアとしての利用が期待される。本研究はアンモニアを燃料として、高効率で電気エネルギーに直接変換するための燃料電池について、新規な発想に基づく構造を提案したものである。プロトン伝導性固体酸化物を電解質として水素透過金属膜をアノードに取り付けた水素膜燃料電池(HMFC)を開発し、NH₃を燃料として低温、高出力の発電を目指した。H₂燃料を用い600℃にて発電試験を行うことにより、従来にない高出力の発電特性を達成した。電気化学インピーダンス解析よりポテンシャル分布や伝導機構を明確にした点も学術的意味も大きい。また、直接アンモニア形水素膜燃料電池を作製し、極めて高い出力データを得ることに成功した。さらに中低温領域での発電が可能となる指針が明らかになった。新規な発想に基づく直接アンモニア形水素膜燃料電池の成果はエネルギーキャリア領域の目的にも十分かなうものであり、また新規性や学術的価値も大きい。

大木 研究者

アンモニアを、金属錯体触媒を用いて低温で合成するための触媒開発を目的とした。複数の金属を分子内に含み、多数のヒドリド配位子を持つ高い反応性を兼ね備えた Fe, Co クラスタ分子や Mo_2Fe_2 ヒドリドクラスタ分子を作製し、その反応性を検討した。本研究で合成された金属錯体はいずれもユニークで複雑な分子構造であり、高い反応性を有しており、数種の錯体によって NH_3 の生成が観察された。一方、高い反応性が同時に触媒としての安定性の障害となるという点で大きな壁となることも明らかになった。当初掲げたアンモニアの触媒的合成という観点からは、十分な活性を得ることはできなかったが、窒素を還元するための錯体合成や関連する新規な錯体群の調製に成功しており有機金属錯体分野での功績は大きいといえる。

中村 研究者

これまでアンモニアの燃焼モデルが含まれる解析例は脱硝反応などに関連したものはあったが、アンモニア燃焼に特化した速度式の解析は十分ではなく、既報の速度式では十分にアンモニアの燃焼を記述できなかった。本研究ではマイクロリアクタを用いた燃焼解析を、アンモニア燃焼に適用することで、従来手法では試験が困難な低温のアンモニア着火特性の計測を実施、気相化学種の分析から新たな燃焼モデルを構築した。マイクロリアクタの試験結果を用いて、より直接的に燃焼反応機構の検証が実現できるよう、化学種濃度分布計測法を構築した。反応経路解析と感度解析により、各化学種の濃度分布に影響が大きく、かつ、反応速度定数の不確かさが大きい素反応を特定し、これらを更新することで、実験結果を再現する燃焼反応機構を構築した。特に N_2 化学種であるヒドラジンに関連する素反応を追加することにより、アンモニアの低温着火過程のモデル精度を高めることができた点は重要である。

日隈 研究者

本研究では NH_3 のクリーン燃料として利用するために触媒燃焼法の適用を検討した。高性能な NH_3 燃焼触媒の材料設計指針を、低温 NH_3 燃焼開始、低 N_2O ・ NO 生成量、耐久性・耐熱性という視点から評価した。比較的低温での燃焼において空燃比 $\lambda = 2$ 程度を中心に触媒開発する方針とした。低い NO 選択率を示したことから、種々の担体に担持した CuO_x の NH_3 触媒燃焼 ($\lambda = 2$) の活性および生成物選択性を系統的に調べたところ、ホウ酸塩担持 CuO_x 触媒が他の担持触媒に比べて、高活性と高 N_2 選択性を示すことを見出した。この触媒性能は、低 NH_3 燃焼開始温度、低 N_2O 及び NO 生成量、十分な耐熱性という点で優れていた。さらに高い性能を有する触媒も開発できた。以上のように本研究によって、高性能な NH_3 燃焼触媒を開発できた点は高く評価できる。

<2014 年度採択>

小林 研究者

新規なアンモニア合成触媒の開発を試み、酸水素化物を担体、及び触媒自身としてアンモニア合成に用いることが可能なことを証明できた。主として活性種を Ru とするものについては、酸水素化物の組成に関しては、Ti 系のもののみが担体として活性を有することがわかり、活性、反応次数、活性化エネルギーなどの速度論的パラメータを網羅的に明らかにし、反応機構を考察した。酸水素化物を担体とすることによって Ru 触媒で問題となる水素被毒が著しく軽減される。また、 ABO_3 ペロブスカイト構造の A サイト構成原子などの電子供与性、同位体交換活性などの評価により、諸物性を明らかにし、特に塩基性が活性にも影響していることを指摘した。無担持の酸水素化物、金属水素化物が単独でも長期間安定な NH_3 合成触媒として働くことを発見した。本研究で発見された触媒は、今後アンモニアのエネルギーキャリアとしての新用途が開拓されれば、十分候補となる触媒である。本触媒の考えられるメカニズムとして、 N_2 分子乖離段階前での水素化や格子中の水素による反応などの可能性が示唆されており、学術的なインパクトは高い。

白石 研究者

光触媒反応により水と O_2 から過酸化水素を製造方法として、励起電子による O_2 の二電子還元 ($O_2 + 2H^+ + 2e^- \rightarrow H_2O_2$) を検討した。本研究ではグラファイト状窒化炭素 ($g-C_3N_4$) が O_2 を選択的に二電子還元する特性を見出し、触媒設計を進めた。 $g-C_3N_4$ は水の酸化に対して低活性であるため、電子受容性のピロメリト酸ジイミドなどのドーピングにより、高い効率で過酸化水素が生成することを示した。また、還元型酸化グラフェン (rGO) と窒化ホウ素 (BN) の複合により、励起電子および正孔を、それぞれ rGO および BN へ移動させて電荷分離を向上させ、粉末光触媒による人工光合成反応における最高効率 (0.27%) を達成できることを示した。さらに、フェノール樹脂を、酸触媒存在下で合成した触媒では、バンドギャップの低下 (長波長吸収) と高導電性の発現により、高い変換効率で過酸化水素を生成させた。さらに、炭素粒子と RF 樹脂の複合により O_2 の二電子還元選択性を向上させ、1% を超える極めて高い変換効率で過酸化水素を生成できることを明らかにした。上述のように目標とする変換効率 2% に向かって着実に光触媒性能は向上しており、1% を超える変換効率で過酸化水素を再生可能エネルギーから合成するメタルフリー光触媒の開発が可能であることを明らかにした。

辻口 研究者

直接ギ酸燃料電池 (DFAC) 高温度での運転時における阻害因子を解析し、アノードの物質移動に起因する過電圧が及びアノードの活性化過電圧の低減が重要であることを明らかにした。アノード触媒開発においては、活性化過電圧の低減に向けて、新たな触媒担体として微粒子埋没カーボンナノファイバーを提案し、その最適化に取り組んだ。その結果、粒子を埋没させた触媒担体の粒子含有量を最適化することによって、従来の 3 倍を超えるギ酸酸

化活性を得ることに成功した。また、薄層触媒層を作製するために、担体へ触媒を担持する際の処理の最適化による高担持触媒の作製にも取り組み、高担持量のPd/Cを作製することに成功した。セルの開発においては、濃度過電圧の改善に向けて超音波を用いた触媒層の形成に取り組み、触媒層の厚さを最適化した。また、物質移動過電圧の削減のために、数値解析を用いた電極内部の物質移動現象の可視化に取り組み、燃料の供給と生成気体の排出をいずれも促進可能な電極設計指針を得ることに成功した。DFAFCの高出力化に向けて、触媒の開発はおおよそ目標通りに進行したが、高出力が得られるDFAFCセルの開発は未達成である。今後、得られた電極設計指針をもとに高出力DFAFCを作製できると考えている。

脇坂 研究者

硫酸/トルエン系マイクロエマルジョンの相分離構造を利用した新規なトルエンの電解水素化を試み、過剰油相から目的のメチルシクロヘキサン(MCH)を回収することに成功した。支持電解質の種類・濃度、界面活性剤のタイプ・鎖長、補助界面活性剤の種類・添加量を検討した。高表面積を有する電極触媒の作製について検討し、金属網担体Pt黒電極触媒においてPt量の低減を可能にした。H型セルを用いた静置定電流電解において、電解電流は十分ではなかったもののトルエン/MCH変換反応のファラデー効率100%を達成した。マイクロエマルジョンが反応場として働くことを明らかにしただけでなく、電解反応機構の解析を進め、電極表面上における水素化反応機構、マイクロエマルジョン中の物質輸送、電極近傍の三相界面構造が及ぼす影響について明らかにした。これらの新しい知見から、酸性電解質中におけるトルエン電解合成に最適なマイクロエマルジョンのタイプ、電極構造および担体の種類が明らかになり、活性な反応場と電極材料に関する今後の開発指針を得た。高電流密度を達成するために、回転ディスク電極による速度論パラメータの評価ならびにフローセルによる実証試験を行っている。

<2015年度採択>

伊藤 研究者

本研究は水素社会実現に向けて再生可能エネルギー電力を固体高分子(PEM)型水電解装置に適応し水素生産の基盤技術を確立することを目指している。水素発生には強酸(水素イオン)を取り扱うため、貴金属以外は陰極として用いられていない。本研究課題では、酸性条件下で溶解しない卑金属電極と金属を一切使用しない炭素陰極の開発を行っている。酸性条件下で溶解しない卑金属陰極は、卑金属ナノ粒子をグラフェンで覆うことで、過剰な酸からの保護と卑金属ナノ粒子の高い触媒機能を両立させた陰極が出来ている。また、金属を一切使用しないグラフェン陰極は、導電性の高いグラフェンの上に触媒能力の高い化学ドーピンググラフェンを別々に成長させることで、触媒サイトと導電性担体の役割の分離に成功し、非常に高い陰極性能を示している。これらは酸性条件下での非貴金属系触媒メカニズム

の知見と触媒設計指針になることが期待されている。

橋本 研究者

本研究では、アンモニア等のエネルギーキャリアを高い混合率で低着火性固体燃料と混焼させることにより、低着火性固体燃料の着火・燃焼特性が改善される効果を解明することを目的としている。乱流場中における固体燃料の火炎伝播実験を行える実験装置を開発した。乱流強度が微粉炭の火炎伝播速度に大きな影響を与えることが分かった。このような研究報告例は世界を見渡しても前例が無く、国際的にもインパクトの大きい成果と考えられる。開発した実験装置を用い、アンモニアの乱流場における球状火炎伝播に関する実験も行っている。微粉炭にアンモニアを混合した場合の乱流場における火炎伝播特性に対する影響を明らかにする予定である。現在、微粉炭-アンモニア混焼において微粉炭火炎とアンモニア火炎を分けて撮影することに成功している。微粉炭-アンモニア混焼に関して、本研究の成果は、混焼メカニズムの解明に貢献できると考えられる。

嶺岸 研究者

本研究においてはこれまでに紫外光応答光触媒シートを利用し、水を水素源としてトルエンを直接水素化、99vol%と高濃度のメチルシクロヘキサン生成が可能な反応系構築に成功している。これは、濃縮の必要の無い水素キャリアが直接得られる人工光合成反応系が構築可能であることを示した最初の例である。この他、太陽光の有効利用を可能とする可視～近赤外領域の光で動作するタンデム構成の反応系構築を可能とする半透明メンブレン一体型光触媒シートも開発した。現在、反応系の構築と高効率化に取り組んでいるが、有意な効率で太陽エネルギーをメチルシクロヘキサンの形に変換できればそのインパクトは世界的に見て大きい。現在までに本研究を通して新規固溶体光触媒材料 $(\text{ZnSe})_{0.85}(\text{CuIn}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{Se}_2)_{0.15}$ を開発、吸収端が 900 nm と近赤外域であるにもかかわらず電圧に換算して 0.9 V の大きな反応の駆動力を示すことを明らかにした。

森 研究者

ギ酸の分解/合成反応をターゲットに、活性点および触媒反応場を精密制御した高活性固体触媒の開発を行った。ギ酸からの水素生成反応では、PdCuCr 三元型合金触媒を開発しその高活性発現機構も明らかにした。また、PdAg 合金ナノ粒子と塩基性メソポーラスカーボンを組み合わせることで従来触媒の 10 倍以上の活性向上に成功し、当初の数値目標を達成した。本触媒は二酸化炭素の水素化によるギ酸合成にも有効であり、両機能性触媒として作用することを見出した。一方ギ酸合成反応では、シングルアトム Ru 触媒、PdAg 合金ナノ粒子担持塩基性メソポーラスシリカ触媒を開発し、さらにその機能と詳細な構造解析および理論計算の結果、重要な触媒設計指針を得るに至っている。ギ酸合成反応における固体触媒の開発例は少なく、本研究成果は次世代触媒開発の重要な知見となりうる。

(2) CREST

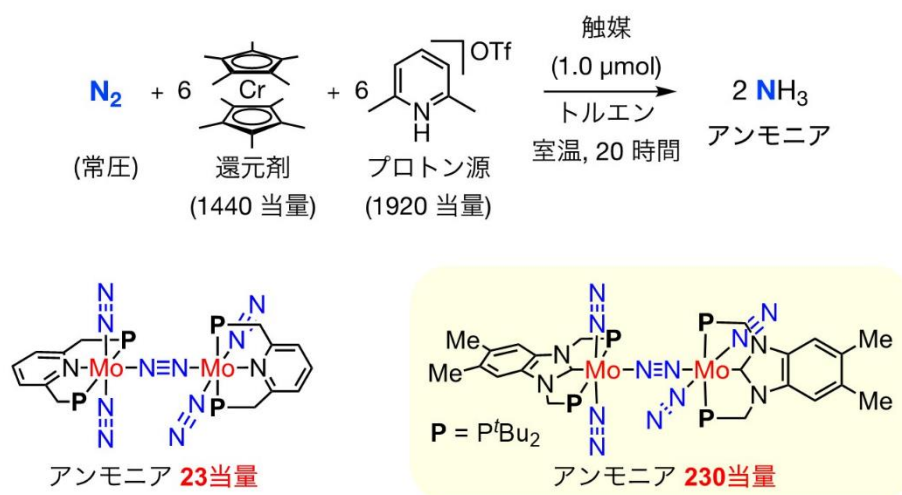
①研究総括の狙いに対する研究の状況

CREST においては、専門領域の異なる複数の研究者が協力して、将来、実現の可能性のあるエネルギーキャリア物質において、その使用環境まで考慮して現実性を示すことが必要であると考えている。当初、興味のある触媒反応、電気化学反応、材料など、特定の専門から出発したチームは多かったが、領域会議などで、エネルギーシステムとしての有効性、量的適応性、エネルギーキャリアとしての有効性を明確にするよう求めたことから、将来のエネルギーキャリアとしての有効性を認識して研究をすすめるようになった。その点では狙いに従った方向性となっている。しかし、研究期間内に試作段階のデバイスや小規模の反応装置から、大きな反応器成績の予想などに結び付けていくには依然努力が必要であり、研究課題に対する多角的視点が必要である。

②科学技術進歩への貢献

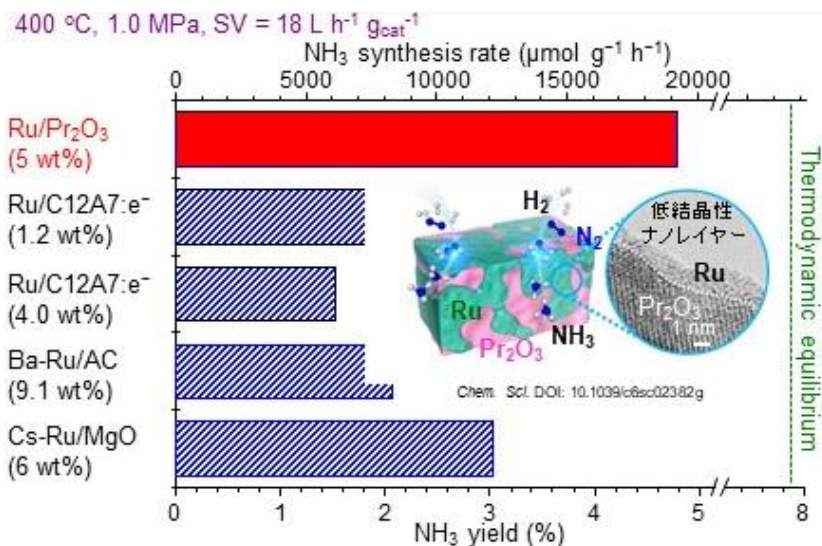
CREST9 チームの論文件数は 109 件(国際 99 件、国内 10 件)に達し、口頭発表は 410 件におよび、その内の招待講演は 151 件であった。

CREST の中では、西林チームから Nature 系雑誌に 2 報が採用されている。窒素を常温常圧の温和な条件で水素化して触媒反応でアンモニアあるいはヒドラジンに変換することは、科学的にも大変に興味深い研究であり、論文の被引用数も多い(*Nature Communications* **2016**, *7*, 12181, 被引用数 29 件、および *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 14291-14295, 被引用数 25 件(2017 年 10 月))。

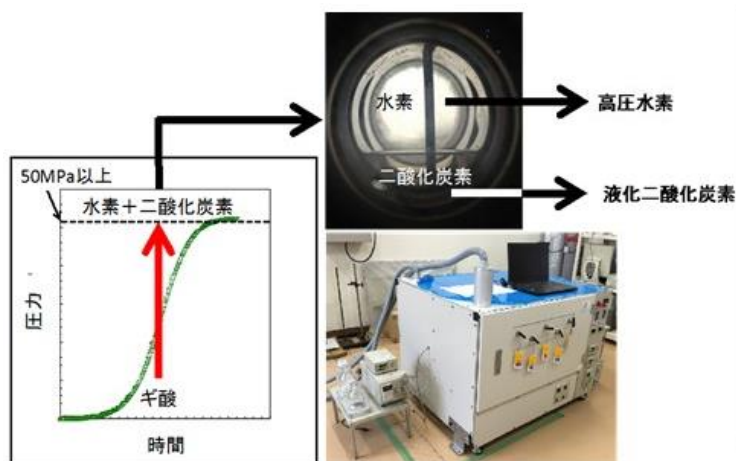


また、永岡チームは、従来プロセスよりも温和な条件で非常に高いアンモニア合成活性を示す Ru/Pr_2O_3 を開発するとともに、①ルテニウムが結晶性の低いナノレイヤーとして担持されていること、② Pr_2O_3 が高い塩基性を有すること、という 2 つの特徴が相乗的に作用す

ことで、アンモニア合成反応の律速段階である窒素分子の切断が促進され、高活性が実現されていることを明らかにし、Chemical Science(英国王立化学会の基幹誌)に掲載された。また、アンモニアを触媒への吸着熱を利用した新しい反応の起動方法で、アンモニアから水素を製造する触媒を見だし、実用に近い分野の研究にも拘わらず、Science Advancesに論文が採択された。



さらに、姫田チームでは、ギ酸から水素を効率的に発生させる現象を利用して、化学エネルギーを圧力エネルギーとして取り出し、高压水素を得る方法を考案した。この手法は、圧縮機を必要としない、簡便でかつ連続して高压水素を供給できる特徴をもつ。本技術では、ギ酸からの水素発生において、イリジウム錯体が容易に 50 MPa 以上の高压の水素と二酸化炭素のガスを連続的に発生することを見出した。



その他、電解合成技術では、水素製造に留まるだけでなく、メタン合成(曾根チーム)、カルボン酸合成(山内チーム)、アンモニア合成(里川チーム)など種々のエネルギーキャリア物質の合成に発展させることができ、有効であることが本研究領域の成果によって明らかになった。今後、電解技術の発展とともに可能性の拡大に貢献していると考えられる。

③科学技術イノベーションへの貢献

アンモニア合成触媒については国内において最近メディアなどで頻繁に取りざたされており、燃料あるいはエネルギーキャリアとしての認識が大きく進展した。これには SIP、ACCEL、及び本研究領域など JST 事業の貢献が大きい。本研究領域の永岡チームで発見された Ru 触媒は従来の Fe 系 Haber-Bosch 触媒や最近発見された他の Ru 触媒を凌駕する高い活性を有する。触媒の担持構造も特異的で注目に値する。最近、複合酸化物担体に担持した Ru 触媒でさらに高い触媒性能が得られることを見出し、PCT 出願を終了した。空気中でも取扱いやすい触媒であることから、実用上の観点からも優れた触媒である。また、同チームが開発した Ru モノレイヤー触媒は、海外の大手化学メーカーからも関心が寄せられていた。

また、ギ酸のエネルギーキャリアとしての有効性は本研究領域のさきがけでも認められているが、CREST の姫田チームはギ酸分解によって超高压の水素が発生できることを明らかにしており、水素の加圧という点でも極めて有望な技術といえる。姫田研究代表者は先導的物質変換領域(ACT-C)でも二酸化炭素と水素からのギ酸製造を検討しており、ギ酸製造面でも実用化に近づいている。

西村チームが開発した水素分離膜は、Pd より豊富に存在する V を用いながら従来の Pd 系膜を凌駕する性能が得られている。同チームは水素分離デバイスを作成するための強度を確保するための構造や接合方法、大面積化、モジュール作製方法についても明確に示しており、今後水素に関連した分離技術として実際に使用される可能性を示す技術となった。

④顕彰、受賞

CREST 研究代表者の内、藤代芳伸研究代表者が第 71 回日本セラミックス協会賞(学術賞)を受賞した。その他 CREST 共同研究者の受賞があった。

⑤進捗が思わしくない事象、懸念事項

藤代チームは中間評価において、検討内容を戦略目標の達成に向けて集中することが必要と判断し、構成するグループの見直しを指導した。具体的には、伊原グループ(東京工業大学)と清水グループ(北海道大学)の研究を中止し、荒木グループ(横浜国立大学)と小倉グループ(関西学院大学)を新設した。

里川チームは電気化学アンモニア合成という、もともと難易度の高い課題を設定しており、世界的にみても優れたアンモニア生成速度を達成したが、採択時の目標に掲げた速度、ファラデー効率には至っていない。革新性が高い課題で、世界的にいくつかの研究例があるが、本研究課題の推進によりその実態と困難さを認識でき、重点的に開発を進めるべき材料群や目標とすべき効率等が明らかになってきた。広範な研究実施範囲を絞り、研究を加速する方向で検討するように指導する予定である。

曾根チームについては開発課題の一つに掲げた新規プロトン伝導体について、伝導率は

高いものが得られたが、膜として電解セルに適応できるレベルにない。当初この膜の開発を待って電解セルを構成する予定であったが、市販電解質を使用する方針に切り替えて、電解セルと触媒反応器の組み合わせたデバイスを早急に試験する方針に変更し、課題の解決に進みつつある。

⑥今後の期待や展望

いずれのチームにおいてもエネルギーキャリアに関するユニークな研究が進行中である。できるだけ出口を意識して、検討を進めており、しかも学術的にも意味の大きい研究が多い。これらの中、水素分離膜、ギ酸分解、アンモニア合成に関する研究課題は比較的出口に近いフェーズにあるため、応用展開を進めるよう期待している。ただし、いまだエネルギーキャリアの実際の使用は先になるため、さらに他のファンドや企業との共同研究などに移行して、発展させることも考えておくべきであろう。数件の電解によるエネルギーキャリア合成反応の研究が進行中であるが、これらのエネルギー源と目されている再生可能エネルギーからの電力の供給が進む必要がある。いずれもユニークな反応へと展開しているため、再生可能エネルギーの導入を待つだけでなく、社会適合性の検討や他化合物などへの展開も進める必要が出てくると考えられる。錯体触媒によるアンモニア合成は従来法とは全く発想のことなる合成法として学術的要素が高く、今後革新的触媒へと進展が期待できる。現在でも関連する研究者から高い評価を受けている。

各チームの研究経過と総括の所見は下記の通りである。

<2013年度採択>

永岡チーム

ハーバー・ボッシュ法よりも温和な条件でアンモニアを合成する触媒について開発を行い、世界最高レベルのアンモニア合成活性を示す Ru 系触媒の開発に成功した。この触媒では、担体との強い相互作用の結果、Ru が粒子状ではなく、低結晶性のナノレイヤーとして担持されていること、塩基性により律速段階である窒素分子の解離吸着が促進され、高い活性を示すことが明らかとなった。近年アンモニア合成の新製造法は注目されている。アンモニアの利用に関連触媒として、触媒の酸点でのアンモニアの吸着熱、あるいは還元した触媒の酸化熱といった触媒の自己発熱を利用することで、室温でアンモニアと空気を流すだけで無加熱・瞬時にアンモニアを分解し水素を製造するプロセスの創成に成功した。還元した触媒の酸化熱を利用する場合は、全てのサイクルで一切の加熱処理を必要としないという、実用上非常に意義のあるプロセスの構築に成功した。触媒上でのアンモニア合成、及びアンモニア分解について第一原理計算を駆使したアンモニア分解・合成プロセスの計算シミュレーションで再現できた。

姫田チーム

安価・大規模な化学系水素貯蔵材料としてギ酸に着目して、高圧水素供給システムの基礎的・基盤的な技術開発を行った。水中 100℃以下の温和な条件下、高性能・高エネルギー効率で、ギ酸から一酸化炭素を含まない“高圧・高品質水素”の連続供給を可能とする錯体触媒の開発を行った。実用に適した温度領域で、低環境負荷かつ高性能・高耐久性なギ酸脱水素化触媒の開発を行い、耐久性の向上にも成功した。この結果、ギ酸脱水素化触媒の新しい触媒設計概念を確立するとともに、中間目標である触媒回転数を上回ることができた。ギ酸から高圧ガスの発生プロセスの構築と、このプロセスを利用した簡便な水素の濃縮技術の開発を行った。結果として、最終目標を上回る 100 MPa 以上のガス発生と、発生したガスの冷却により気液および固気分離を行い、水素純度 95%以上の高圧水素が得られた。本手法はポンプレスで高圧かつ高純度水素ガスを供給できるため、ギ酸を用いた水素ガスステーションへの実証検討を目指した技術開発の目処が立った。

藤代チーム

共電解セル・スタック試作技術・評価技術開発として、触媒反応のみのメタン合成反応での転化率に対して優位性を持つ二段階での電解セル試作技術開発を進め、(1)高温向けセルで高い電解電流密度を達成することに成功した。一方低温向けセルで、CO₂水素化によるメタン合成反応が電気化学的に促進される現象を見いだした。さらにプロトン伝導型共電解セルの試作プロセスを開発し、酸化物イオン伝導型共電解セルと異なる電極反応促進効果を確認した。電極触媒粉体の無電解条件における素反応解析、(2)電解条件におけるメタン合成のモデル化実験にて素反応の電気化学的な促進効果の解析を行った。Ni 触媒を用いた CO₂からのメタン合成の実験結果を再現する詳細反応モデルを得ることが出来た。従来の水電解利用メタン合成システムよりも、提案する共電解システムの方が逆シフト反応の向上と低電流での転化反応を促進し、1.5 倍程度高効率なメタン合成システムになる可能性があることが判明した。

<2014 年度採択>

里川チーム

新規なアンモニア製造技術として、電解合成法に取り組んでいる。プロトン伝導性固体電解質を用いて、カソードに窒素、アノードに水蒸気を供給する電気化学セルでアンモニア合成に成功した。運転温度域のことなるセラミックス系固体電解質、リン酸塩系固体電解質を用いたアンモニア電解合成システムの研究を並行して進めている。セラミックス系固体電解質にサーメット電極を組み合わせ水-窒素系で既報を超えるアンモニア生成速度を得た。さらにこの電解セルを用いた反応機構の解明に取り組み、アンモニア生成反応が電気化学的に進行していることを明らかにした。リン酸塩系電解質についてはパラジウム膜とアンモニア合成触媒を組み合わせ新規電解セルを考案した。リン酸塩系固体電解質材料を用いたアンモニア電解合成とプロセス効率計算に取り組み、リン酸塩系電解質を用いた系で

初めてアンモニア電解合成に成功した。

曾根チーム

水素を回収炭酸ガスと反応させることでメタンを合成しエネルギーキャリアとする技術の有効性を示すことを主目的としている。炭酸ガスのメタン化反応の低温化、吸熱反応域水電解の実現により高効率水素製造の個々のプロセスを試験し、今後両者を組み合わせたデバイス化に移行する。メタン化反応温度の低温化について、低温で活性を示す触媒の合成に成功した。水の電気分解において熱自立電解電圧は 1.48V であり、加圧供給した水をこれより低電圧の吸熱域で高い電流密度域で電解可能なセルの設計・試作に成功した。炭酸ガス還元時の熱入力を活用しつつ、電解を吸熱的に行うためのスタックの設計、試作を進め、要素試験を通じて要素技術の検証を進めるに至っている。ガス拡散層の導電率を損なわない表面撥水加工技術や、カーボンペーパー側面や背面を含めた全面の撥水手法、撥水触媒層の作成技術等、エンジニアリング上の課題解決に成果をあげた。一方、新規プロトン伝導体の開発については依然材料探索の段階である。

西村チーム

エネルギーキャリアからの水素分離・精製に、高価で資源量も少ない Pd 膜に代わるバナジウム系合金膜を初めて適用し、水素分離デバイスを試作した。V 系合金膜に Pd 表面層をつりつけた分離膜構造を確立し、エネルギーキャリアを含む混合ガス中での V 合金の水素固溶特性、水素透過特性、機械的特性の基礎的な性質や構成成分に関するデータを整備した。合金成分について探索を行い、混合ガス中での水素化特性に及ぼす合金効果を明らかにした。作動温度による性能や劣化の状態を明確にし、動作条件についての知見を得た。実際に差圧がかかった時の応力の効果や、破断の対策などについて検討し、水素分離デバイスを作製するための強度を確保するための構造や接合方法、大面積化、モジュール作製法を明確にし、実デバイス化に近づけた。アンモニアやメチルシクロヘキサンなどエネルギーキャリア由来の微量ガス成分が含まれる分解模擬ガスを供給し、共存ガス種の影響などを明らかにし、劣化要因とはならないことを明らかにした。

<2015 年度採択>

西林チーム

錯体触媒を用いた新しいアンモニア合成法の開発に取り組む。分子触媒を用いて窒素ガスから触媒的にヒドラジンが直接生成した世界発の例を示すことができた。実用化を見据えた高効率なアンモニア合成法の開発に関しては、種々のピンサー型配位子を持つ金属窒素錯体を触媒とするアンモニア合成に使用し、モリブデン窒素錯体が常温常圧の温和な反応条件下で進行する触媒的窒素固定反応における有効な触媒として働くことを明らかにした。従来の触媒活性を凌駕する触媒あたり最高 230 当量のアンモニアが生成する世界最

高の触媒活性を示した。触媒反応を理論計算と組み合わせることによって、さらに高活性の触媒の設計にフィードバックした。また、実用化を見据えた反応開発を目的として、担持系触媒の開発と大規模スケールの触媒合成についてそれぞれ研究を展開中である。空気、水、太陽光からのアンモニア合成法の開発のために、水をプロトン源とした触媒的アンモニア合成反応の開発に成功した。

山内チーム

グリコール酸の水溶液は、化学的に安定で、かつ、高いエネルギー密度を有するため、輸送・貯蔵コストが少ないエネルギー媒体として期待される。本研究では、シュウ酸と水からグリコール酸の連続的製造を可能にする高分子電解質型アルコール合成セル (Polymer Electrolyte Alcohol Electrosynthesis Cell, **PEAEC**) を作製することを目的とする。はじめに、基質透過性を有するカソードおよび PEAEC に適した膜-電極複合体の作製を行う。また、DFT 計算を用いて TiO_2 上でのシュウ酸還元機構の解明を行い、触媒の性能向上のための指針を得ている。さらに、水酸化のための光アノードとして WO_3 粉末を塗布した光電極に紫外光や可視光を照射したところ、シュウ酸還元の効率が上昇することを明らかにした。また、 TiO_2 カソード上では、約 80% の高い電流効率でグリコール酸生成することがわかった。水溶液透過性を有する網目状の Ti 材料を用いて、高活性のシュウ酸還元カソードを作製し、膜-電極接合体 (MEA) を構築することで、世界で初めて PEAEC の構築に成功した。

山口チーム

本研究では高効率な液体燃料直接型燃料電池の開発へ向けて、高性能かつ高耐久な固体アルカリ燃料電池の触媒・触媒層、および膜電極接合体 (MEA) の開発基盤を構築することを目的としている。アニオン伝導性ポリマーの耐久性向上のために、主鎖のエーテル結合の開裂による分解が主たる機構であることを明らかにし、対策となる材料設計指針を提案した。触媒については、アルカリ環境におけるカーボン担体の表面腐食による触媒粒子の脱離を解決するため、カーボンフリー・金属ナノ粒子連結触媒の開発を行い、アルカリ溶液中において市販 Pt/C 触媒より極めて高い酸素還元活性を得ることに成功した。また、脱 Pt 化へ向けて、Pt フリー・ヘテロ元素コードープグラフェン触媒を開発し、市販 Pt/C 触媒を僅かに上回る性能を得た。さらに、得られた触媒と電解質を組み合わせた MEA を用いてギ酸直接供給型燃料電池の発電試験を行い、高出力密度と高耐久性の両立に成功した。

7. 総合所見

(1) 複合領域のマネジメントについて

本研究領域の目標達成のため、CREST・さきがけとも研究者と総括・アドバイザーの打ち合わせの機会を多く持ち、順調な成果の取得と目標の達成に向けた、かじ取りが進むよう配慮している。主たるものはさきがけの年2回の研究進捗検討会、及びCREST・さきがけ合同の年2回の領域会議である。サイトビジットも定期的実施するものはもちろんであるが、必要があれば不定期なサイトビジットも開催するなど、CREST研究チームの打ち合わせにも要請があればアドバイザーとともに積極的に参加している。検討会、領域会議のアドバイザー出席率が高いのはもちろんであるが、サイトビジットなども多くのアドバイザーのご参加をいただいている。研究がうまく進まなくなったときには、その問題に最適の専門性を持ったアドバイザーまたは総括に会って、相談する機会を積極的に持ってもらい、それら不定期な会合も、総括、JST領域担当が把握できるようにしている。

さらに本研究領域はCREST・さきがけ複合領域であるため相互の情報も年2回の領域会議を合同で実施することにより、成果が見えやすくするよう心掛けている。そのため、アドバイザーもCREST・さきがけで共通で同じ視点からのアドバイスができるようにしている。また各研究者は領域会議での情報・意見交換にとどまらずいくつかのテーマについては専門性の似た研究者同士で打ち合わせを不定期に実施している。例えば、本研究領域にはCREST・さきがけともエネルギーキャリアとしてのアンモニアに関する研究に携わっている複数のチームあるいは研究者が属しているが不定期に情報交換、打ち合わせを行っている。このような領域内の意見交換は奨励され、活発に行われている。複合領域で研究を進めている効果が現れたものといえる。

(2) 複合領域としての研究成果の見通し

CREST・さきがけ複合領域としての本研究領域の成果を概括すると下記の通りとなる。

- (i) 新規アンモニア合成プロセスの開発
- (ii) 燃料としてのアンモニア利用技術の開発
- (iii) ギ酸のエネルギーキャリアとしての有効性の提示
- (iv) 多様な電気化学反応のエネルギーキャリア合成への応用
- (v) 光触媒反応のエネルギーキャリア合成への応用
- (vi) 高性能なV系水素透過膜開発

(i) 新規アンモニア合成プロセスの開発

触媒によるアンモニア合成プロセスは、特に国内において最近いくつかの研究チームが高活性な触媒を開発しており、本研究領域のCREST及びさきがけで見出されたいくつかの固体触媒は、他で開発された触媒とも十分競合し得る性能を誇っている。アンモニアのエネルギーキャリアあるいは燃料として使用が現実味を帯びて来れば、Haber-Bosch法に代

わるプロセスとして、実用化に向けた検討対象とされると考えられる。アンモニアの錯体触媒合成や電解合成は CREST2 件、さきがけ 1 件が実施されているが、固体触媒反応よりも難易度の高い技術として、実用化の検討は先の将来になると考えられるが、科学技術への貢献という点ではインパクトは大きく、特に錯体触媒合成は国際的にも学会で取り上げられている。

(ii) アンモニア利用技術の開発

本研究領域ではアンモニアの利用技術の開発にも取り組んできた。6(1)で青木研究者のアンモニア燃料電池の開発について言及したが、その他にもさきがけのアンモニア利用技術としての燃焼は、火炎燃焼と触媒燃焼に関する研究課題をさきがけで 3 件採択した。いずれもエネルギーキャリアあるいは燃料としてのアンモニアの利用技術として重要となることは間違いない。特に火炎燃焼については基礎的な機構解析やモデリングのベースとなる研究であり、アンモニア燃焼の応用を推進している SIP プロジェクトで情報を利用すべく、情報交換を行っている。触媒燃焼についてはこれもさきがけのアンモニア直接燃料電池との共同研究として、未来社会創造事業において新たなプロジェクトを実施するに至っている。

(iii) ギ酸のエネルギーキャリアとしての有効性の提示

本研究領域ではギ酸をエネルギーキャリアとして合成、利用する研究課題を CREST で 1 件、さきがけで 2 件実施している。ギ酸のエネルギーキャリアとしての認知度は未だ低く、NEDO や SIP でも取り扱われていなかった。本研究領域の研究を推進することによって、そのポテンシャルを大きく知らしめることになった。特に、ギ酸分解錯体触媒反応による超高压の発生は化学的な高压水素の発生という、重要な発見に結びついており、機械式圧縮機と比較して実用化に向けたアピールポイントとなっている。CREST・さきがけで推進されているギ酸の研究は今後のエネルギーキャリア候補物質としての可能性を大きく示すものである。ギ酸燃料電池に関する課題はさきがけネットワークの研究課題としても推進されることになっている。その他、カルボン酸であるグリコール酸も新規エネルギーキャリア物質として提案され、研究が進んでいる。

(iv) 多様な電気化学反応のエネルギーキャリア合成への応用

エネルギーキャリア物質の合成技術として触媒合成のほかに、CREST で 3 件、さきがけで 3 件の電解合成が検討されたのも本研究領域の特徴である。電解合成の対象物質としては前述のアンモニアのほかに、水素、メタン、メチルシクロヘキサン、カルボン酸と多様である。再生可能エネルギーからの安価な電力が入手可能となった場合、電解合成がエネルギーキャリア物質直接合成の有力な手法であることを示すことができた。電解方式や動作温度、電解質系は各研究課題で大きく異なっており、多様で新規な電気化学セルが研究さ

れている。このように多様な電気化学反応をエネルギーキャリア合成に展開できた点は本研究領域の成果であり、これらの技術は他の電気化学的合成反応にも展開可能である。

(v) 光触媒反応のエネルギーキャリア合成への応用

本研究領域では2件のさきがけが光触媒反応によるエネルギーキャリア合成に携わっている。光触媒反応は他のプロジェクトでも推進されているが、この2件はエネルギーキャリアにもかかわる境界領域の研究として採択された。この内、さきがけ白石研究者が取り組んだ過酸化水素合成については、エネルギー消費型の合成反応であるが光量子収率が極めて高く、物質合成法としても注目される。一方、メチルシクロヘキサンはすでにエネルギーキャリアとしての認知度も高いが、さきがけ嶺岸研究者の成果では触媒反応ではなく光触媒反応で単一のデバイスで合成できる点がユニークで、再生可能エネルギーから直接エネルギーキャリア合成ができる重要な研究例である。原理的には強い太陽光と受光する十分な面積があれば、デバイスを放置しておけばメチルシクロヘキサンが合成できることになり、現在実現可能な効率に向けて性能の向上を行っている。

(vi) 高性能なV系水素透過膜開発

水素利用技術として水素分離膜がCRESTで検討されている。Pd系の膜はよく知られているが、それよりも安価で、かつ透過速度のはるかに高いV系膜の開発により、十分に実用化を見通せるレベルに達し、すでにデバイス化や強度耐久性の向上も視野に立っている。

このようにそれぞれの研究課題で開発のステージや適用分野は異なっているが、いずれもエネルギーキャリア研究としては興味深いものである。

(3)-1 本研究領域を設定したことの意義

エネルギーキャリアの研究は最近の水素製造利用技術の進展と再生可能エネルギーの将来利用の機運から世界的に活性化されつつある。アンモニアについては、本研究領域で見出された合成触媒、電解合成、錯体合成はユニークで新規性が高く、また学術的にも高く評価される研究となっている。電解合成や燃料電池などの電気化学セルはエネルギーキャリアの製造、利用で重要であることが本研究領域によって再認識され、ここで開発された電極材料や電気化学セルは新規性が高く、他の電気化学反応にも展開可能なものが多い。また、光触媒反応によるエネルギーキャリア物質の製造の試みなどは直接、再生可能エネルギーからの製造という点で注目される。本研究領域はCREST・さきがけの公募制度に則っているため、エネルギーキャリアの必要な研究課題を網羅することはできないが、それぞれの課題はエネルギーキャリア開発の重要な位置を占めており、学術的にも評価される研究となりつつあると考える。

(3)-2 国内の NEDO や SIP におけるエネルギーキャリアプロジェクトとの比較

国内においては NEDO や SIP のエネルギーキャリア関連プロジェクトも推進されている。このように複数のプロジェクトが並行して実施されていることは、この関連課題が特に国内において、将来極めて重要になるという認識によるもので、将来の再生可能エネルギーの大規模利用やエネルギーセキュリティの面から多角的に進める必要がある。NEDO の水素利用等先導開発事業や SIP のエネルギーキャリアプロジェクトは実証や実用化につながる開発フェーズを扱っており、本研究領域の CREST・さきがけがシーズや革新性の高いフェーズを扱うのとは大きく異なる。したがって、NEDO、SIP が実用化を目指した大規模化、実証を強く志向するのに対し、本研究領域は出口を見据えつつも学術性も重要視している。研究内容としては NEDO が水および水蒸気電解、液体水素貯蔵、水素大規模利用、パワーツーガス (P2G) 関連、メチルシクロヘキサンの利用、水素を取り巻くトータルシステムなどを取り扱っており、SIP では太陽熱利用、アンモニアの合成と利用、有機ヒドライド、液体水素利用、安全性評価などのテーマを担当している。アンモニア合成と利用、P2G 関連、メチルシクロヘキサン、水電解などキーワードは一部本研究領域と重なっている部分もあるが、触媒や合成手法、利用法など NEDO、SIP とは材料や手法が異なっており、重複する技術はない。特に穏和な条件でのエネルギーキャリアの合成、種々のエネルギーキャリア物質の電解合成の試みなどは本研究領域の特徴といえる。一方、これらプログラム間でキーワードが共通のテーマについては相互の情報交換が重要であるため、NEDO、SIP 研究者との交流の機会も個人、グループ、領域のいずれのレベルでも頻繁に持つようにしている。さらに、ギ酸やカルボン酸、過酸化水素などは他のエネルギーキャリアプログラムでは取り扱われておらず、触媒合成、電解合成と光触媒反応の境界領域を扱っているのも本研究領域の特色といえる。

NEDO や SIP は細分化、明確化されたテーマについての公募であるのに対し、CREST・さきがけは広くエネルギーキャリア分野から公募して優れた提案課題を採択する制度上の違いが大きい。水素のトータルシステム解析やエネルギーキャリアの安全性評価は CREST・さきがけでも重要であるため報告会などで情報収集をするよう努めている。

(4) 今後への期待、展望

エネルギーキャリア領域は学際的領域であり触媒化学、電気化学、化学工学、システム工学、機械、環境化学など種々の側面からの評価が必要な学問分野である。また将来の目的が明確なため、実用化してからの評価もそれぞれの開発ステージにおいて求められる。CREST・さきがけは新規性や学術的側面も求められる。そのような中でギ酸などの新しいエネルギーキャリアを提案できるなど、新規な触媒や反応、新規な電気化学セルなど発想から始まり有効性を示すことができた。今後これらがエネルギーキャリアとして注目され、実用化されることを期待している。また、実用化に至らなくても新規な反応やシステムは注目に値するため何らかの新領域として発展することを期待している。

また、本研究領域のさきがけは2018年度で全研究課題が終了するが、終了後であってもCRESTの研究者と情報交換できるよう、領域会議へのさきがけ卒業生の参加を可能とする方針を検討している。

(5) 所感、その他

さきがけ研究については研究者、アドバイザー、総括が一丸となって、今後の方針を検討し、様々な視点から助言を与え軌道修正してきた、さきがけ研究者にとってはこのように多くの専門の異なる研究者からの意見を受けながら指針を定めていく貴重な機会であったと考えられる。今後の研究者としての発展に結びつくものと信じる。CRESTについてはチーム型研究のためもともと多角的な視点から研究を推進するが、エネルギーキャリアのカバーする分野は広く、アドバイザーを中心とした広い視点から実用化の出口をうかがいつつ研究を進めることができ、発展性を発揮することができている。

以上