

革新的 GX 技術創出事業 (GteX) チーム型研究  
「水素」領域  
年次報告書

令和5年度  
研究開発年次報告書

令和5年度採択研究開発代表者(チームリーダー)

[研究開発代表者(チームリーダー)名:折茂 慎一]

[東北大学 材料科学高等研究所・所長]

[研究開発課題名:  
革新水素貯蔵ー水素反応の精密解析とデジタル技術の援用ー]

実施期間 : 令和5年10月1日～令和6年3月31日

## §1. 研究開発実施体制

### (1) 材料グループ

#### ① グループ参画者:

グループリーダー: 近藤 剛弘 (筑波大学数理物質系・物質工学域、教授)

主たる共同研究者: 折茂 慎一 (東北大学材料科学高等研究所、所長・教授)

主たる共同研究者: 岡本 啓 (東北大学金属材料研究所、助教)

主たる共同研究者: 佐藤 豊人 (芝浦工業大学工学部、特任准教授)

主たる共同研究者: 花田 信子 (早稲田大学先端理工学部、専任講師)

主たる共同研究者: 榎 浩司 (産業技術総合研究所エネルギー・環境領域  
エネルギープロセス研究部門、グループリーダー)

主たる共同研究者: 藤田 健一 (京都大学大学院人間・環境学研究科、教授)

主たる共同研究者: 竹下 博之 (関西大学化学生命工学部、教授)

主たる共同研究者: 藪 浩 (東北大学材料科学高等研究所、教授)

#### ② 研究項目

- ・材料機能の多様性に基づく革新性の追求(主担当)
- ・高压反応と解析領域の拡張 および DX 化と MI/PI および数理科学の導入(支援)

### (2) 解析グループ

#### ① グループ参画者:

グループリーダー: 齋藤 寛之 (量子科学技術研究開発機構、GL)

主たる共同研究者: 山本 春也 (量子科学技術研究開発機構、上席研究員)

主たる共同研究者: 大友 季哉 (高エネルギー加速器研究機構、研究主幹)

主たる共同研究者: 池田 一貴 (総合科学研究機構、副主任研究員)

主たる共同研究者: 徳増 崇 (東北大学流体科学研究所、教授)

主たる共同研究者: 味戸 沙耶 (東北大学金属材料研究所、助教)

主たる共同研究者: 上床 美也 (東京大学物性研究所、教授)

#### ② 研究項目

- ・高压反応と解析領域の拡張(主担当)
- ・材料機能の多様性に基づく革新性の追求 および DX 化と MI/PI および数理科学の導入(支援)

### (3) DXグループ

#### ① グループ参画者:

グループリーダー: 杓掛 健太郎 (理化学研究所、研究員)

主たる共同研究者: 佐藤 龍平 (東北大学材料科学高等研究所、特任助教)

主たる共同研究者: Hao Li (東北大学材料科学高等研究所、准教授)

主たる共同研究者: 濱田 幾太郎 (大阪大学工学研究科、准教授)

主たる共同研究者: 清水 亮太 (東京大学大学院理学系研究科、准教授)

## ② 研究項目

- ・DX 化と MI/PI および数理科学の導入(主担当)
- ・高圧反応と解析領域の拡張 および 材料機能の多様性に基づく革新性の追求(支援)

## §2. 研究開発成果の概要

NEDO 燃料電池・水素技術開発ロードマップ(2023 年 2 月改定版)でバックキャスト的検討により設定された水素貯蔵材料に関する 2040 年の仮目標の実現に向けて、本事業では 2027 年度までの目標を設定、最新の水素科学に基づく開発指針の確立を目指す。

材料グループでは、水素貯蔵材料の高圧反応やマルチモーダル解析のための新たな装置群の設計を開始、それらを設置するための「高圧水素環境安全管理システムを備えた研究開発専用スペース(東北大学内、約 200m<sup>2</sup>)の整備」を進めた。また、汎用元素群を主成分とする新たな金属系材料、および多孔質を中心とする非金属系材料を選定、それぞれに特有の材料機能に注目した「貯蔵水素の高密度化のための新概念の有効性・課題の解明」に向けた研究開発も開始した。特に 2023 年度は、「金属水素化物と錯体水素化物との連続的遷移の観点からの Si 系・Al 系材料の合成」を進めるとともに、「非金属系材料の水素貯蔵(吸着)測定に関する複数の大学・研究機関でのクロスチェック体制」も構築した。

解析グループでは、材料グループと連携した「水素貯蔵材料から放出された水素ガスをオペランド検出できる世界初の水素対応走査電子顕微鏡の国内装置メーカーとの共同開発」を進めた。加えて、DX グループと連携した「水素貯蔵材料用ハイスループット成膜技術の自動化・自律化を目指した装置設計」を開始した。さらに革新要素技術研究(2024 年度から解析グループに参画)において、JRR-3 の中性子ビームによる「水素貯蔵タンク内での水素のイメージング・可視化のための基盤技術」も構築した。

DX グループでは、「最新の AI 技術を駆使した水素化物データベースの構築に向けた技術開発」を主導、実際に試作版を作成した。さらに解析・材料グループとの連携により、「スーパーハイドライド(超化学量論組成水素化物)の反応シミュレーションによる新たな知見」を獲得した。

### 【代表的な原著論文情報】

2023 年度は無し