

革新的 GX 技術創出事業 (GteX) 革新的要素技術研究
事後評価結果

1. 領域

「水素」領域

2. 研究開発課題名

錯体水素化物のアンミン錯体形成による高水素密度化

3. 研究開発代表者名 (機関名・役職は評価時点)

宮岡 裕樹 (広島大学 自然科学研究支援開発センター 特定教授)

4. 評価結果

評点: B やや劣っている

総評:

本研究開発課題は、種々の錯体水素化物のアンミン錯体を調製し、その特性を系統的に評価するとともに、in-situ 分析や分子シミュレーションを用いて水素等の化学状態を詳細に解析し、高容量水素貯蔵材料の設計指針を得ることを目指すものである。

研究期間において、挑戦的なアプローチにより錯体水素化物の反応挙動の観察や理論的整理を行った点は評価できる。一方で、錯体水素化物からのアンミン錯体形成は観察されず、本研究開発課題が目指す革新的な高容量水素貯蔵材料の創出には至らなかった。また、分子シミュレーションを用いてアンミン錯体形成メカニズムの検討を進め、一定の成果を得た点は評価できるが、反応機構の全容解明や分子設計指針の明確化にはより詳細な考察が必要であると思われる。さらに、現時点で想定されるアンミン錯体の形成は実用範囲の圧力下で反応を行えるか、あるいは水素の可逆的な吸蔵・放出が可能かなどの点で懸念がある。

今後は、本研究開発課題の強みである計算科学による反応機構解析のアプローチを他の材料系にも活用し、実用性を考慮した水素貯蔵材料開発への貢献を期待する。

以上