

# Energy Outlook

International Institute for Carbon-Neutral Energy Research

OCTOBER  
2015

## 材料の持つ無限の可能性 ～国際的な科学技術協力で挑戦～

Special Interview

イアン・ロバートソン

ウィスコンシン大学 マディソン校 工学部長

板岡 健之

九州大学カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所  
エネルギーアナリシス研究部門長代理 教授

# Special Interview

Ian M. Robertson ⊗ Kenshi Itaoka

## 材料の持つ無限の可能性 ～ 国際的な科学技術協力で挑戦 ～

材料科学は、エネルギー変換効率の改善と炭素強度の削減を目指す研究において重要な役割を果たしている。材料科学と計算科学の融合は、多くの重要課題に対する答えを提示し、予測手法を向上させる可能性を持つ。実験、データ、計算に関するツールの統合、そしてデータを共有することは、研究イノベーションを推進し、カーボンニュートラル社会実現のプロセスに新たな技術の応用とコスト削減をもたらす。材料科学にはどのような可能性が秘められているのだろうか。

### エネルギー効率研究の 原動力としての材料科学

**板岡健之**(以下・板岡)・・・今後、温室効果ガスを大幅に削減していくためには二つのアプローチがあります。第一にエネルギー変換や利用効率を上げること、そして第二にエネルギーの炭素強度を下げることで。この二点には多くの研究者が注目していますが、どうすれば材料科学がこの研究を推進できるのか、またどの分野を優先すべきなのでしょう。

**イアン・M・ロバートソン**(以下・ロバートソン)・・・質問の対象は大変多岐に渡ります。例えば、電力変換システムの作動温度と効率を上げたい場合、特に過酷な動作環境下で長期間使用するのであれば、既存の特性を大幅に改善した新しい材料が必要となります。輸送に関して言うと、自動車の軽量化も一つの課題です。軽量化可能な材料を作ることができれば、燃焼機関であれ、燃料電池であれ、電気自動車であれ、どのような種類の車であっても燃料効率は改善します。大幅な軽量化には安全面の懸念があるものの、エネルギー利用の点において意味のあることです。

**板岡**・・・自動車の軽量化は以前から話題となつていますが、特に炭素複合材、プラスチック、アルミ素材の分野では依然として改善と開発の余地がありますね。

**ロバートソン**・・・私も複合材、高分子系、アルミニウムやマグネシウム合金の分野にはチャンスがあると思っています。また、今日使用されている鋼鉄と同等の強度を持つ、より薄い鋼板の開発も必要です。軽量化は既存の研究分野だと考えられています。極めて今日的な課題です。特に電気自動車と燃料電池自動車に関しては、効率の向上、使用する材料の改善にはまだ長い道のりがあります。燃料電池自動車については、水素供給とその変換効率を高めるために必要な触媒を検討することも重要です。水素社会の実現には、再生可能エネルギーから十分な量の水素を安価に生

産することが大きな課題であると考えています。水素生産のための触媒を改善する上で材料科学が果たす役割は大きいのです。また、自動車自体については、無駄になつているエネルギーをいかに回収し再利用するかを考えることも重要です。どのような方法であれ、搭載型でより多くのエネルギーを生成することが重要であり、例えば余剰エネルギーの生産能力を高めるためのフィルム型太陽電池などにおいて、材料が果たす役割があります。日本の場

### いたおか けんし 板岡 健之

九州大学カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所(I<sup>2</sup>CNER)  
エネルギーアナリシス研究部門長代理 教授

1984年東京藝術大学美術学部芸術学科卒業後、1986年千葉大学工学部工業意匠科で修士を取得。その後、1992年にウィスコンシン大学マディソン校都市地域計画学科環境自然資源計画専攻の修士を取得。2011年に東京大学大学院工学系研究科博士取得。(株)富士通ゼネラル、みずほ情報総研(株)を経て2013年九州大学I<sup>2</sup>CNERに着任。同年11月から現職。



イアン・M・ロバートソン

## Ian M. Robertson

ウィスコンシン大学マディソン校 工学部長

1978年ストラスクライド大学(スコットランド、グラスゴー)にて応用物理学の学士取得、1982年オックスフォード大学(イギリス、オックスフォード)にて金属学の博士を取得。1983年からイリノイ大学アーバナ・シャンペーン校材料科学学部教授。2003年から2009年まで同大学で材料工学部長を務め、2011年から2013年まで米国国立科学財団(NSF)の材料研究部門長、2013年3月、ウィスコンシン大学マディソン校9代目工学部長に就任。1982年に金属及びセラミクスにおける優れた科学的業績に対しDOE Awards for outstanding scientific accomplishment in metallurgy and ceramics、2011年には水素脆化のメカニズム解明への貢献に対しEIE燃料電池プログラム賞をそれぞれ米国エネルギー省から受賞するなど数々の教育及び研究に関し受賞。また2014年にはASM Edward DeMille Campbell Memorial Lectureshipの表彰を受けた。



合、水素と水素自動車への転換を図る際のもう一つの大きな課題は、構造材料の水素との適合性でしょう。水素が持つ金属劣化特性はよく知られていますが、いつ劣化が起こるのかを予測することはできません。水素自動車で使用される材料と水素との適合性を理解することも重要になるでしょう。水素自動車に関わる材料科学のもう一つの課題は、搭載型で軽量な再生システムを作ることで、これは高圧ガスタンク利用の代替手段となります。しかし自動車での使用に必要な熱力学及び力学的な特性を備えた金属ヒドリド錯体はまだ見つかっていません。

板岡：高圧貯蔵からの転換に対して懐疑的な人もいますが、研究が進むにつれ実現可能なものとなるかもしれませんね。

### 材料科学と計算科学の融合

ロバートソン：例えば適切な搭載型軽量水素貯蔵材料を特定するという課題に対しては、候補となるシステムの発見を早めるために計算科学を活用することが考えられます。計算科学を用いれば、何千という可能性の中から最も有望な組成物を特定することができ、実際に合成し、加工し、検査しなければならぬ組成物の数を減らすことにつながり、課題をより扱いやすくしてくれます。実験プログラムと連動した計算材料科学は、課題を解決する上でとてもない可能性を秘めていると思います。計算ツールがシステムの動作環境を考慮できるようにするのが理想ですが、私たちは特定されたシステムを作成する能力も必要です。

板岡：大規模な実験を行わずに、材料耐久性の計算が可能でしょうか。材料耐久性を評価する実験は大変難しいですが、この点で計算科学は役に立っているでしょうか。ロバートソン：過去十年間で計算ツールキットには驚くべき進歩が見られました。特に応用に関連した環境下での材料特性について考える場合、第一原理から連続体レベルの計算にまで発展させることはいまだ課題のままで、この分野には大幅な向上が必要です。それでも実験は、シミュレーションやモデルの予測をテストする上などでも不可欠なものです。重要なのは、これらが相互に助け合い将来の方向性を導くことができるよう相乗的に機能させることです。このカップリングが材料ゲノムイニシアチブ(MGI\*)の重要な側面の一つとなっています。

板岡：私たちの現在の活動では実験を重視していますが、計算科学はFZNERでの研究にも貢献することができると思っています。アメリカでの材料科学と計算科学融合の取り組みはどのくらい進んでいるのでしょうか。ロバートソン：アメリカでは計算科学と実験プログラムが協力的に運営されている優れた例が数多くあります。しかし、まだまだ多くの進展がなされるべきで、これがMGIの目標の一つにもなっています。科学界で過去に先例のないレベルでの進歩、協力そしてコミュニケーション自体がチャレンジなのですが、こういったものが適切な空間及び時間スケールに及ぶ次世代アルゴリズムを開発するために必要となります。私はこの

計算ツールと実験ツールの統合が、FZNERが主導的役割を果たし、他との差別化を図る機会になるだろうと考えています。

板岡：計算科学者を集めるために注力しなければなりませんね。

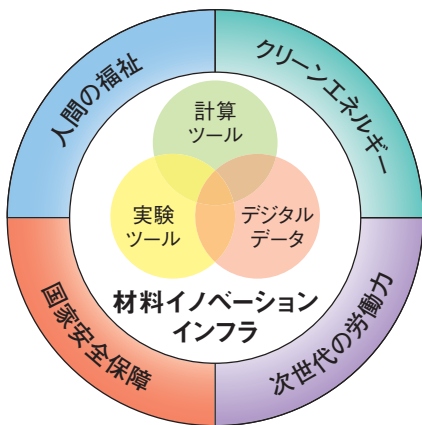
ロバートソン：そうですね。自分の持つスキルをFZNERの研究に活かす意欲のある計算科学者を発掘する必要があります。そのような人材をFZNERのプログラム全体に参加させ、実験を行う研究者と相互的な交流を促すことも大切です。

### 研究イノベーションを推進するデータ共有の重要性

ロバートソン：私たちが考えなければならぬもう一つの問題はデータに関するものです。水素経済の実現に関わる膨大な量のデータがFZNERにも世界中にも存在しており、これらのデータの共有、検索及び視覚化の方法の研究を始めれば、新たな発見につながるのではないかと思います。産業界には学術界よりもずっと上手くデータ共有を行っているところもあります。FZNERはデータを広く利用可能にし、それによって研究イノベーションにおける指導力を発揮することで、日本におけるリーダーになるチャンスがあると思います。

板岡：現在のところ、研究データセットの共有に関する協定は二者間のものしかありません。データをより広範に利用可能なものにするには、確かに革新的なアプローチですね。そのようなアプローチを取る際、知的財産権に関連する問題は生じるでしょうか。

\*MGIはアメリカ国内における材料の発見と展開を加速しまた持続するためのインフラ開発を目指す、政府による多様な利害関係者から成る試みである。https://www.whitehouse.gov/mgi



材料イノベーションインフラ

出典：材料ゲノムイニシアチブ戦略プラン、  
材料ゲノムイニシアチブ、科学技術会議技術委員会、  
材料ゲノムイニシアチブ小委員会 2014年12月

**ロバートソン**：そうですね、知的財産権の問題は解決する必要がありますでしょう。とはいえ、データ発表前に第三者に利用されないようにするためのデータセットの取扱方法は存在しています。ICNERに関して、まずは生み出されたデータを所内全員で共有することが第一歩となるでしょう。科学者に適切なフォーマットでデータを保存させるなど、これを可能とするシステムの構築が課題となります。アメリカでも同様の取り組みがなされています。

## 材料イノベーションインフラ

**ロバートソン**：MGIの取り組みの背後にある主要な考え方は材料イノベーションインフラというもので、これは(1)計算ツール、(2)デジタルデータ、(3)実験ツール(特性の合成、加工及び評価を含む)という三つの要素から成ります。それぞれの分野に進展の可能性があります。これらがすべて含まれ交差する場所において、全能力發揮と最大化の可能性が存在します。この

材料イノベーションインフラというコンセプトは材料科学だけではなく、科学と工学のあらゆる分野に活用できるものです。

## 温室効果ガス排出削減に向け開発途上国と協働

**板岡**：中国とアメリカが最大の温室効果ガス排出国となっていますが、開発途上国による排出の割合も上昇し続けています。新素材はこれらの国々の排出量を削減し、人々の生活の質を高め経済活動を促進することに貢献できるかもしれません。しかし、資金的制約のため途上国では一般的に、安価でエネルギー効率の低い材料や機器が使用されています。材料科学はこれら途上国が直面している様々な課題の克服にどう貢献できるでしょうか。

**ロバートソン**：教育が非常に重要となります。エネルギー転換技術がどのように利用できるのか、また効果的に技術を利用できるかを人々に示していかなくてはなりません。技術を共有し、途上国が安価に利用できるようにする必要があります。私たちは自分たちの社会がよりエネルギー効率を高め、省エネを推進するよう啓発を続けている途中なのです。自分たちの持つ知識と教育ツールを途上国へ移転することが支援につながります。世界的な課題の一つは、電力供給に対する消費者の見方を変えることです。

**板岡**：ご指摘のように教育と低コストは重要な要因ですね。先進国ですら、コストが高額になればそのシステムは普及不能になってしまいます。私たちが直面してい

る課題は、機能を向上させた先進材料をどのようにして安価に開発していくかという点になりますね。

**ロバートソン**：そのとおりです。現在、研究室である材料が発見されてからその展開と応用までにかかる期間は、多くの産業で20年程度です。MGIの目的とその基となる考え方は、この期間を大幅に短縮し、材料開発過程の各段階にかかる費用を削減していくというものです。この開発過程は発見フェーズから、開発、特性最適化、システム設計と統合、認定、製造そして展開フェーズにまで及ぶものです。天然資源を使い続けるにつれ材料供給の持続可能性と回収がますます重要になってくるため、この最終フェーズではそれらの分野も対象としてなくてはなりません。開発過程の全フェーズを並行して進めることができれば、製品に使用される新素材にかかる時間と費用を大幅に削減できる可能性があります。

## 材料科学推進のための国際協力

**板岡**：ICNERのエネルギー研究におけるミッション推進のために、材料に関わる私たちの国際ネットワークをどう活用できるでしょうか。

**ロバートソン**：ICNERは材料、CO<sub>2</sub>回収貯留及び燃料電池分野での国際ネットワーク構築において目覚ましい進歩を成し遂げています。多くの海外の研究者や研究所がICNERとの交流を希望しており、これはカーボンニュートラル社会に向けた取り組みの中でICNERが確立した評

価や名声を物語るものです。も「ICNERがデータ科学や計算科学においてリーダーとなり、ノウハウや何が可能になるのか示すことができれば、先導的研究機関としてのICNERの地位はさらに高まるでしょう。エネルギーアナリシス研究部門によるロードマップ策定とそのロードマップに研究を組み込むアプローチは大変素晴らしい、ICNERの方向性に大きなインパクトを与えています。このようなアプローチを採用している例は海外でもそれほど多くなく、これは研究分野の壁を取り除くための重要な発展だと思っています。

**板岡**：多くの研究機関が同様のロードマップに取り組んでいますが、私たちの強みは基礎科学研究と直結しているということです。

**ロバートソン**：そうですね。将来、水素を基盤としたカーボンニュートラル社会を実現する上での障害物を特定するためのICNERの活動は、大変重要だと思えます。研究の方向性を導く方法としてロードマップを利用するという「ICNERの戦略は非常に革新的なものです。もちろん外部からの評価も重要なので「ICNERの業績をより多くの人々に発信し、進行中の成果の取り組みも必要となるでしょう。「ICNERのこれからの発展に大いに期待しています。

**Special Interview**  
Ian M. Robertson × Kenshi Itaoka



## 1 CO<sub>2</sub>鉱物化による岩石間隙形状の変化と相対浸透率へもたらす影響

Fei Jiang and Takeshi Tsuji  
Physical Review E  
DOI: 10.1103/PhysRevE.90.053306

CO<sub>2</sub>地中貯留において、貯留層に圧入したCO<sub>2</sub>は最終的に鉱物化すると考えられている。CO<sub>2</sub>が鉱物化すると、貯留層の水理特性は変化するが、その変化は十分に解明されていない。本論文では、格子ボルツマン法と有限体積法を統合したシミュレーションによって、鉱物化に伴う水理特性の変化を推定した。私たちの考案した間隙閉塞モデルでは、まず間隙流体速度から移流拡散方程式を用いてカルシウムイオン濃度を計算し、そのイオン濃度を考慮して局所の間隙格子を固体格子に変更するというものである(図1)。この開発した鉱物化モデルを、実験結果と比較・検証を行った上で、ベレア砂岩の間隙形状モデルに適用した。この鉱物化モデルを使ったシミュレーションの結果から、鉱物化によって間隙サイズが縮小し、絶対浸透率が低下するプロセスを再現することに成功した。一方、相対浸透率では、水は鉱物化にあまり影響されず、CO<sub>2</sub>の方が大きく低下することが解明された。本研究より得られた結果はI<sup>2</sup>CNERのCO<sub>2</sub>貯留研究部門のロードマップにおける、貯留されたCO<sub>2</sub>の挙動の解明に大きく貢献できると予想されている。

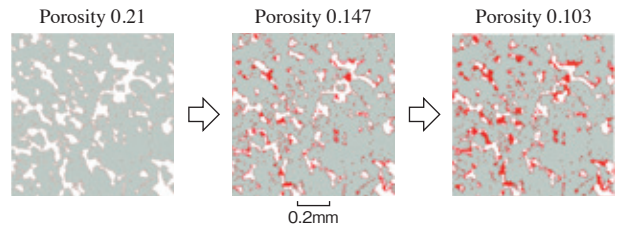


図1 Porosity(間隙閉塞モデル)で計算したベレア砂岩断面での沈殿パターン(灰色:岩石、白:空隙、赤:沈殿した鉱物)

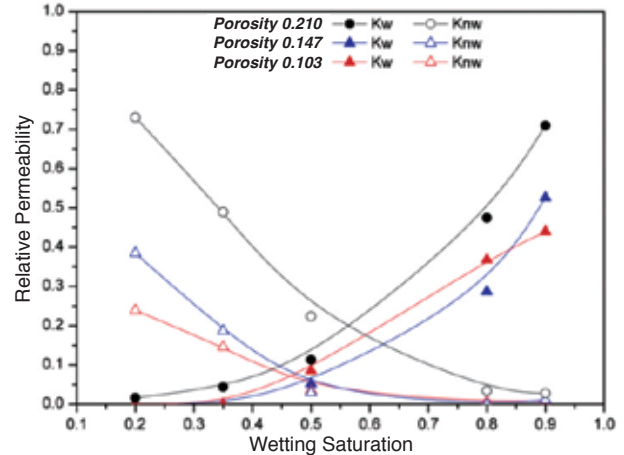


図2 鉱物化による相対浸透率の変化。KnwはCO<sub>2</sub>の相対浸透率、Kwは水の相対浸透率

## 2 非等温場での気泡の上昇：表面張力の非単調温度依存性

Manoj Tripathi, Kirti C. Sahu, George Karapetsas, Khellil Sefiane, and Omar K. Matar  
Journal of Fluid Mechanics  
DOI: 10.1017/jfm.2014.659

自己湿潤性流体はある特定の温度にて表面張力が最小になるユニークな性質を有するため、伝熱面の乾燥を防ぐ機能により冷却デバイスへ適用することで冷却性能の大幅な向上が期待されている。宇宙空間などでの利用を想定した際、様々な重力場においてデバイスの作動流体中に生じる気泡の挙動を把握する必要があるため、本論文では重力場が気泡の挙動に及ぼす影響を理論数値計算で検討した結果を示している。図1は重力が強い場(a)と弱い場(b)での流路内における気泡の挙動を示しており、重力が強い場合には気泡の変形が大きいものに対して、重力が弱いと変形が小さいことが分かる。図2からは流路内における気泡発生位置が、気泡サイズに影響することを示している。自己湿潤性流体中における気泡の基本的な挙動を把握することはデバイス設計の重要な指針となり、ヒートパイプなどの冷却デバイスの小型化・高性能化による熱エネルギー有効利用を促進することが出来る。

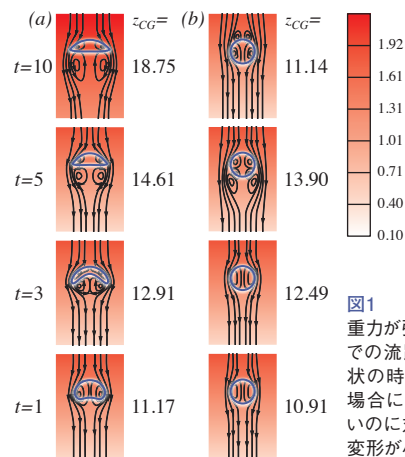


図1 重力が強い場(a)と弱い場(b)での流路内における気泡形状の時間変化。重力が強い場合には気泡の変形が大きいものに対して、重力が弱いと変形が小さいことが分かる。

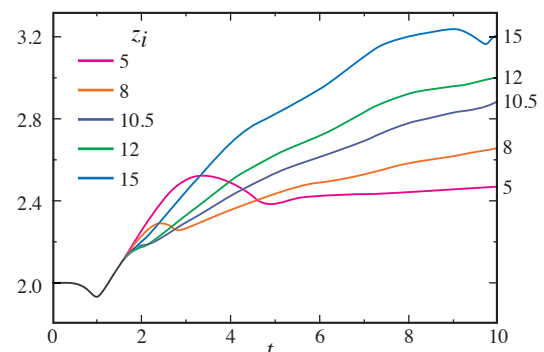


図2 気泡サイズの時間変化に気泡発生位置が及ぼす影響。流路内にて気泡が発生した位置が、気泡サイズに影響することを示している。



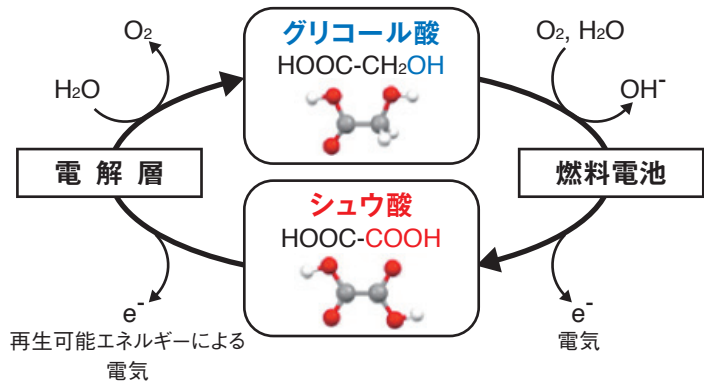
### 3

## グリコール酸／シュウ酸還元対の高選択的な電気化学反応により実現されたCO<sub>2</sub>排出のない電気エネルギーの循環

Ryota Watanabe, Miho Yamauchi, Masaaki Sadakiyo, Ryu Abe, and Tatsuya Takeguchi

Energy & Environmental Science  
DOI: 10.1039/C5EE00192G

再生可能エネルギーを基盤とする循環型社会の実現には、需給バランスが大きく変動する再生可能エネルギーに由来する電力の効率的な循環システムの構築が重要な鍵となる。そこで、本研究ではグリコール酸(GC)とシュウ酸(OX)の還元対をエネルギー媒体とするCO<sub>2</sub>排出のない新たな電気エネルギーの循環システムの構築を試みた。触媒としてTiO<sub>2</sub>を用いることで、温和な条件(-0.5~-0.7 V vs. the RHE, 50°C)でシュウ酸からグリコール酸への効率的変換(ファラデー効率>98%)により、媒体への直接的な高密度(8700 MJ/m<sup>3</sup>)の蓄電が可能となった。さらに、私たちはアルカリ形燃料電池を使ってグリコール酸を高選択的にシュウ酸にすることで、CO<sub>2</sub>排出のない発電にも成功した。この成果により、私たちは触媒的物質変換研究部門の中長期的な目標の達成に近づくことができた。



グリコール酸／シュウ酸還元対を用いたCO<sub>2</sub>排出のないエネルギー循環を描いた模式図

### 4

## 界面張力が多孔質砂岩内のCO<sub>2</sub>残留分布に与える影響

Fei Jiang and Takeshi Tsuji

Water Resources Research  
DOI: 10.1002/2014WR016070

日本でのCCS(二酸化炭素の回収、貯留)の実施に当たって、安全性、キャパシティ及び地層にもたらす影響を慎重に評価する必要がある。本論文では数値シミュレーションを用いて、効果的に残留トラップが働く状態の特定を目的として、界面張力が残留CO<sub>2</sub>クラスターに与える影響を調べた。まずベリア砂岩の間隙形状をマイクロCTで抽出し、デジタルロックモデルを構築した。その岩石モデルに対して革新的な格子ボルツマン法を適用することで、間隙内における二相流体計算を行った。水で飽和されている岩石にCO<sub>2</sub>を圧入し(Drainage)、その後再び水を圧入する(Imbibition)シミュレーションを実施することによって、残留CO<sub>2</sub>分布を計算することに成功した。計算で得られた残留CO<sub>2</sub>クラスターに対して、サイズ、長さ、接触面積の分布を分析し、界面張力がこれらの性質に与える影響について検討を行った。その結果、界面張力を増やすにつれて、残留CO<sub>2</sub>クラスターのサイズが大きくなり、トラップ量が増加する傾向があることが分かった。一方、低い界面張力では、広い界面面積をもたらす、溶解及び鉱物トラッピングにとっては有利に働くと考えられる。この結果はI<sup>2</sup>CNERのロードマップのCO<sub>2</sub>貯留量を向上する目的に役立つと考えられる。

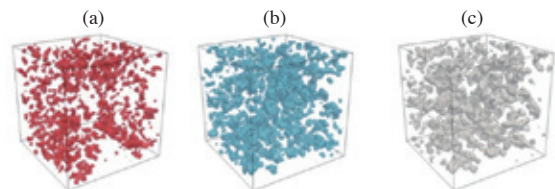


図1 多孔質砂岩内における異なる界面張力下でのCO<sub>2</sub>残留分布(赤:低張力、青:中張力、白:高張力)。低い張力条件(a)では残留CO<sub>2</sub>が小さい球状となる。一方、高張力条件(c)ではサイズが大きく不規則なクラスターの状態でCO<sub>2</sub>が存在する。

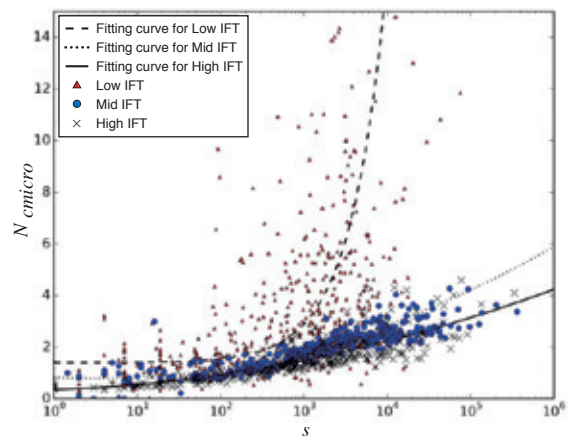


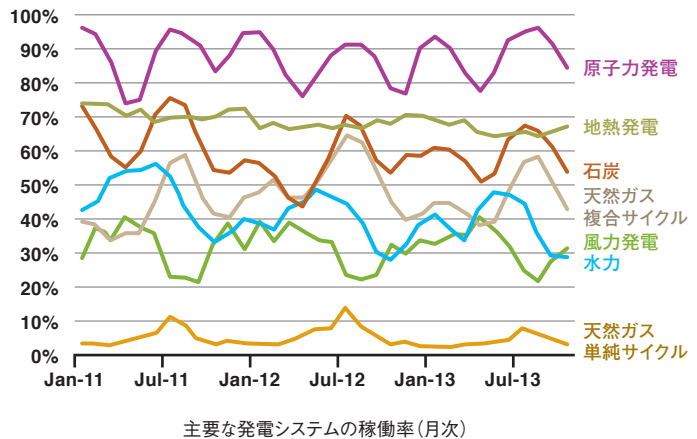
図2 異なる界面張力下での残留CO<sub>2</sub>の大きさと安定性指標N<sub>micro</sub>との関係。高い界面張力条件では安定的にトラップされることが示されている。



## 5 再生可能エネルギーの増加に伴う電力システムの運用ダイナミクスと再生可能エネルギーの最大限活用への道筋

Xuping Li, Mark Paster, and James Stubbins  
Renewable and Sustainable Energy Reviews 47(2015)1007-1015  
DOI: 10.1016/j.rser.2015.03.039

本研究は、電力システムにおける再生可能エネルギーのダイナミクス及び影響を分析し、再生可能エネルギー統合に関連する障害とその解決策を明らかにするものである。多くの人が懸念する変動性の問題は、変動電源に特有というわけではない—電力システム運営者は1世紀以上にわたり需要変動に対応してきた。変動電源に対する予想が十分正確であれば、電力システム運営者はリアルタイムで需要と供給のバランスを取ることが可能である。ベースロード発電機は数日間もしくはそれ以上の期間、ほぼ継続して作動させることが可能であり、容量の割合に対してより多い電力を供給できる。これは高レベルの変動電源にとって制限要因となるだろう。電力負荷に追従する能力は、高レベルの変動電源を電力システムに統合することを可能にするための、非・再生可能エネルギー発電の主要な性能指標となるべきであり、より柔軟性の高い発電所に対するインセンティブを与え、変動電源のスムーズな一体化を確実なものとするための行政の施策が必要であると思われる。



## 6 多孔質のマイクロモデル内での多層高圧CO<sub>2</sub>と水からなる高圧の混相流の速度場

Farzan Kazemifar, Gianluca Blois, Dimitrios C. Kyritsis, and Kenneth T. Christensen  
Water Resources Research  
DOI: 10.1002/2014WR016787

地下深部の塩水帯水層(塩水で満たされた多孔質の岩石構造)へのCO<sub>2</sub>の貯留は、再生可能エネルギー源の導入が増加する一方で、温室効果ガスの排出量を低減するための実行可能な解決策として注目されている。これらの地層へCO<sub>2</sub>を安全に貯留し、圧入されたCO<sub>2</sub>のトラッピング効果を上げることは、I<sup>2</sup>CNERのCO<sub>2</sub>貯留研究部門における二つの重要な目標である。この目標を達成するには、様々な要因の中でも特に、圧入中・圧入後の流動場を調べることが重要となる。本論文は、蛍光顕微鏡とマイクロPIVを組み合わせる方法論を紹介するものである。この手法を使えば、多孔質のマイクロモデル内でのCO<sub>2</sub>と水からなる高圧の混相流の時間的、空間的な速度場をとらえることができる。このアプローチは、貯留層条件下(80bar, 30°C)の間隙スケールにおける混相流の物理を研究する上で重要なツールとなる。

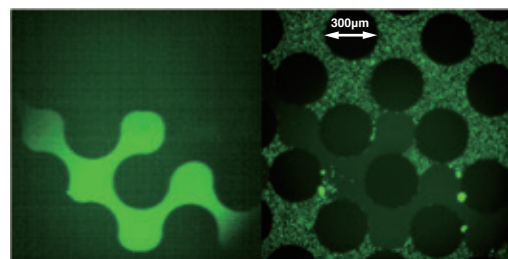


図1 左:カメラ1で撮影した染色されたCO<sub>2</sub>画像 右:カメラ2で撮影したトレーサー粒子

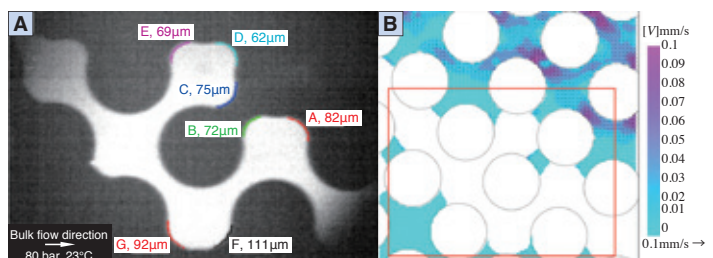


図2 (A)境界面の曲率半径を示したCO<sub>2</sub>の蛍光画像 (B)同じ時間の水の流速ベクトル(赤い長方形は、図2(A)に対応する領域を示す。)