

CRDS-FY2010-SP-05

戦略プログラム

エネルギー高効率利用社会を支える 相界面の科学

STRATEGIC PROGRAM

Phase Interface Science for Energy Efficient Society



独立行政法人科学技術振興機構 研究開発戦略センター
Center for Research and Development Strategy, Japan Science and Technology Agency

エグゼクティブサマリー

本戦略プログラムでは、エネルギー利用の効率化を進める上で鍵となる「相界面の科学」の研究を、国として戦略的に推進することを提案する。

地球温暖化、資源枯渇などの地球規模の課題を克服し、豊かな持続性社会を構築するためには、供給側だけでなく、転換部門から需要側までを広く俯瞰し、エネルギー問題への貢献度を吟味した上で、既存技術におけるエネルギー利用効率を極限まで高めるとともに、新たなエネルギー技術を開発する必要がある。増加の一途をたどる膨大な化石エネルギー消費を、量的、経済的に代替できるエネルギー源は、2030年を考えてもいまだ確認されていない。従って、今後のエネルギー技術の検討においては、再生・非再生エネルギーに関わらず、膨大な量を扱い得ることに加え、低コストであることの2点が特に重要となる。革新性と量的貢献の両面から広くエネルギー問題を俯瞰的に捉えると、以下のように相界面の基礎学理と設計・製造・制御の技術基盤の重要性が浮かび上がる。

エネルギーを利用する様々な機器やシステムには、固体、液体、気体といった異なる状態や異なる物質が互いに接する境界（相界面）が必ず存在し、そこで生じる力学的、化学的、あるいは電磁気学的な現象を利用するものが多い。エネルギー技術の理論的最高性能（限界性能）の実現を阻む損失は、すべて、エネルギーの変換、輸送、貯蔵プロセスにおける不可逆性が原因であるが、それらの多くはこの相界面で生じている。これらの損失を大幅に削減することが、省エネルギー、効率改善、新エネルギー利用のすべてにおいて本質的に重要である。つまり、相界面におけるエネルギーキャリアの輸送と変換の素過程の全容を解明し、それらの知識を基に不可逆損失を最小化する設計を可能とすることによって、実システムでの機能や効率を限界性能に近づけることができる。一例として、将来、究極の高効率発電を担うと期待されるガス化複合発電技術（IGFC）に含まれる相界面での諸現象を図1に示す。高温で作動する固体酸化物形燃料電池の多孔質電極界面、ガスタービン翼の乱流伝熱界面、ガス化反応界面や排気触媒界面、希薄燃焼火炎界面、ガス分離膜界面など、様々な相界面の現象解明と高度な設計は、エネルギー利用効率向上や温暖化防止に大きな効果を有する。この例が示すように、相界面現象の基礎学理や制御・最適化技術を深化させることによって、様々なエネルギー機器の飛躍的な損失削減、機能発現機構の創造が可能となる。結果として、基盤技術の性能向上と低コスト化が図られ、我が国が得意とするエネルギー関連技術をさらに振興する道が開かれる。

上記の目標を達成するためには、相界面現象のプロセスや素過程の解明、ならびに最適化や制御のための設計技術が必要となる。相界面は、ナノ、メソ、マクロのマルチスケール構造の各階層に存在する。ナノメートルでの現象解明や材料研究の成果を、実システムに活かすためには、 10^{12} にも及ぶ幅広いスケールバンドを統合的に扱うことが必要である。このような幅広いスケールの現象を総合的に解析・設計するための計測技術、モデリングとシミュレーション技術、相界面構造を具体的に制御・最適化するための工学や数理科学を開拓することにより、先端的な基礎研究の成果を実際の機器やシステムの設計に反映す

ることが可能となる。また、現象解明や材料開発を担う研究者、具体的な構造を実現する設計研究者の、ディシプリンを越えた連携と融合が欠かせない。材料系、化学系、機械系、電気系、システム系、さらには物理系、数理系の研究者が、エネルギー高効率利用を目的に結集し密接な連携を図ることによって、新たなブレークスルー達成の可能性が広がる。また、エネルギーに関わる基礎研究の成果は、最終的には量産プロセスに反映されなければ意味が無い。このため、実製品の要求機能や資源的あるいは環境的な制約条件を、早い段階から基礎研究にフィードバックするプロセスが欠かせない。産業界とアカデミアの研究者ネットワークを構築するなど、社会ニーズを基礎研究の課題設定に適宜フィードバックする体制や仕組み作りも重要となる。

なお、相界面現象は、様々なエネルギーキャリアが、異なる相（気・液・固）の間で輸送・変換されるプロセスであり、人類のあらゆる生産・消費活動に関わっている。本戦略プログラムによる成果はエネルギー利用に限らず、広く他分野にも転用できる共通基盤的なものであり、その波及効果は極めて大きいといえる。

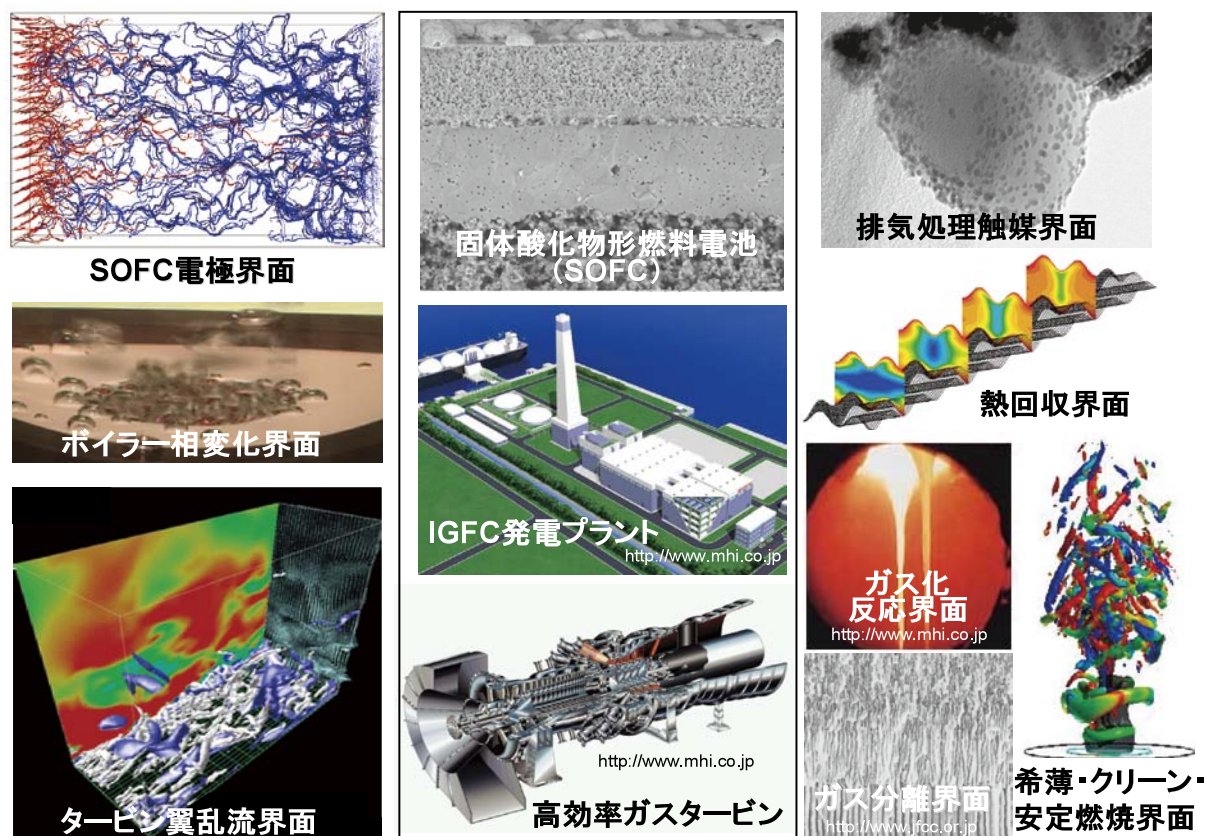


図1 ガス化複合発電 (IGFC) における相界面現象の例

Executive Summary

This report proposes that the government should strategically promote the basic research on "Phase Interface Science for Energy Efficient Society," which must be a key for highly efficient energy utilization.

In order to overcome global issues such as global warming and resource exhaustion and establish a sustainable well-being society, it is indispensable to attain ultimate energy efficiency as well as to develop novel energy technologies by keeping a wide range of perspective from the supply side to the demand side. Unfortunately, there is no confirmed single energy resource that can substitute enormous fossil energy consumption economically and quantitatively, even if we envision the year of 2030. Therefore, it is mandatory to satisfy the following two requirements for energy technologies to be developed regardless of renewables or non-renewables, *i.e.*, a substantial volume which meets huge global energy consumption, and a sufficiently low cost to be competitive against conventional energy supplies. Considering the energy issues broadly from viewpoints of revolutionary and quantitative contributions, it becomes clear that we should promote research for basic science, design, manufacturing and control technologies for phase interface phenomena.

In any energy device or system, interfaces or boundaries exist between different materials and different phases such as solid, liquid and gas, where mechanical, chemical and/or electromagnetic phenomena take place. All losses, which hinder the achievement of theoretically best possible performance of energy technologies, originate from irreversibility in the energy conversion, transport and storage processes, and they take place mostly at phase interfaces. It is thus crucial to drastically reduce these losses for much better energy saving and energy efficiency and for new energy introduction. In other words, the performances and efficiencies of real energy systems can be pushed toward the best limiting values by exploring the entire fundamental processes of energy transport and conversion and also by enabling designs that minimize the irreversible losses. For example, Fig. 1 shows phase interface phenomena found in an integrated gasification fuel cell system (IGFC), which is considered as an ultimate power generation system in the future. Analyses and advanced design methodologies of various phase interfaces, *e.g.*, fuel cell electrodes, gas turbine blades, gasification and exhaust gas catalysis surfaces, lean burn combustion flame interfaces, gas separation membranes, will as a whole lead to ever more efficient energy utilization and global warming prevention. As in this example, deepening the basic phase interface science and developing control/optimization technologies will enable drastic reduction of energy losses and creation of unprecedented functional processes. This will eventually strengthen the nation's

lasting competitiveness in the energy related technologies through drastic improvement in the efficiencies and costs of conventional as well as new technologies.

In order to achieve these goals, analyses for understanding phase interface processes and elementary steps as well as design sciences for optimizing and controlling the phase interfaces are required. Phase interface phenomena take place at multiple levels from nano, meso to macroscopic scales. In order to exploit breakthroughs in nano scale material research for designing macroscopic scale systems, it is required to handle comprehensively the phenomena of diverse scale ranges across ten orders. Development of measurement techniques and modeling and simulation tools, which can holistically analyze and design multi-scale systems, will make it possible to reflect fruitages from advanced basic research in real applications. In addition, collaboration and amalgamation of analytical and synthetical researchers is indispensable. A breakthrough can be achieved only when multidisciplinary scientists and researchers, *e.g.*, material, chemical, mechanical, electrical, physical and mathematical researchers, are invited to gather together and collaborate under the shared mission objective for energy. In addition, it is very important that the basic research outcomes should eventually be integrated into mass production processes. In order to facilitate this knowledge transfer, it is recommended to feedback required functions and also environmental constraints to early stages of basic research. It would help if institutional measures are taken to form researchers' networks between academia and industry, and social and economical needs are taken into account when thematic prioritization is made in the basic research.

Phase interface phenomena are the processes that energy carriers are transferred and converted between different materials and phases, and in fact they are found in every human activity. Thus, the outcomes of phase interface science research will produce extensive spill-over effects being applied not only to energy related technologies but also to a much wider range of applications, so their impacts on the industry and the society will be enormous.

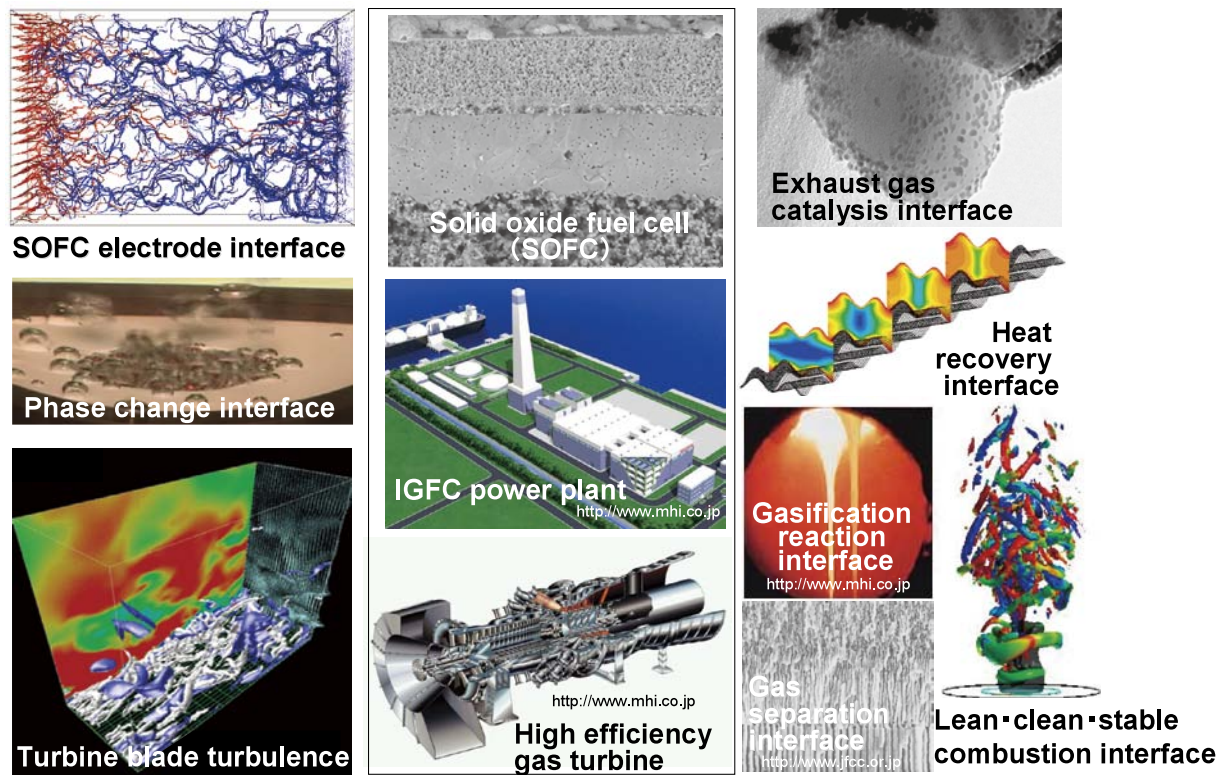


Fig. 1 Phase interface phenomena in integrated gasification fuel cell combined system (IGFC).

目 次

エグゼクティブサマリー

Executive Summary

1. 提言の内容	1
2. 研究投資する意義	3
2. 1 グリーン・イノベーションへの貢献	3
2. 2 社会のロバスト性向上に寄与するエネルギー基礎研究開発	4
2. 3 エネルギー相界面学理の構築と新技術の創出	5
3. 具体的な研究開発課題	8
4. 研究開発の推進方法	12
5. 科学技術上の効果	13
6. 社会・経済的効果	14
7. 時間軸に関する考察	17
8. 検討の経緯	20
9. ワークショップで紹介された研究開発課題例	23
9. 1 表面性状改質による伝熱促進	23
9. 2 熱ふく射による光電変換	24
9. 3 燃料電池電極	25
9. 4 不均一系触媒および光触媒	26
9. 5 二次電池電極	27
9. 6 熱電変換界面	28
9. 7 ナノフルイディクスと吸着現象	29
9. 8 電極反応のマルチスケールシミュレーション	30
9. 9 カーボンナノチューブ生成	31
9. 10 乱流制御	32
参考文献.....	33

1. 提言の内容

本戦略プログラムでは、エネルギー利用の効率化を進める上で鍵となる「相界面の科学」の研究を、国として戦略的に推進することを提案する。エネルギー技術における損失は、すべて、エネルギーの変換、輸送、貯蔵プロセスにおける不可逆性が原因であるが、それらの多くは相界面で生じている。これらの損失を大幅に削減することが、省エネルギー、効率改善、新エネルギー利用のすべてにおいて本質的に重要である。本戦略プログラムは、エネルギーに関わる相界面現象の解明や設計技術を高度化することの意義、具体的課題、研究投資の効果についてまとめたものである。

化石資源に代わるエネルギー源で、増加の一途をたどる膨大なエネルギー消費を量的に賄えるものは残念ながらまだ確認されていない。また、化石燃料に対して価格競争力に勝る技術でなければ、真の代替技術とは成り得ない。つまり、エネルギー関連技術の研究開発においては、当該技術が膨大な量を扱えることに加え、低コストで実現できることの2点が特に重要である。このような視点に留意しつつ、広範なエネルギー技術において共通して鍵を握る、種々のエネルギーキャリア、すなわち、原子、分子、イオン、電子、フォトン、フォノンなどが界面をよぎって輸送される、あるいは他のキャリアに変換される相界面現象に注目し、その素過程の全容解明、およびそこでの不可逆損失を最小化するための設計（最適化、制御）のための科学を推進することを提言する。

実際のエネルギー機器での相界面の最適化や製造プロセスにおいては、ナノオーダーから 10^{12} 倍にも及ぶ幅広い空間スケールにおける個々の現象に対する要素研究に加え、それらを接続し融合するシステム研究が本質的に重要となる。そこで、材料系、化学系、機械系、電気系、システム系さらには物理系、数理系の研究者が分野横断的に連携し、マルチスケールに階層的に存在する相界面現象を扱う。すなわち、マルチディシプリンによる相界面のマルチスケールテクノロジー研究開発を実践する。また、基礎研究から製品開発までの研究開発プロセスをつなげ、社会ニーズを確実にフィードバックする体制や仕組みを導入し、基礎研究段階から製品としての要求機能や制約条件を意識した取り組みを行うべきである。

目的基礎研究は、我が国の当該分野の科学技術力の基盤の持続的強化に貢献するだけでなく、同じ目的を共有して多様な研究者が協働すること（convergence）により、学術ディシプリン、基礎研究と応用研究、大学・国研・産業界などのそれぞれの間に横たわる様々なギャップを克服し、科学技術を進展させ、イノベーションを創出する有力な方法として認識されている。一方、相界面現象の科学はエネルギー利用の基本を支えるに留まらず、社会の様々な生産消費活動にも関わっている。そうした広範な科学技術的、社会的波及効果を有する相界面科学を目的基礎研究として取り上げ、その総合的推進に取り組み、科学技術の強化と人材の育成を図ることを我が国の目標のひとつとすべきである。

以上、本戦略プログラム提案の要点を整理すると、図2に示すようになる。

■ 相界面現象はエネルギー輸送と変換の本質的素過程

相界面におけるエネルギーの輸送と変換が、エネルギー機器の機能や効率を決定する本質的な素過程となっており、また、そこでの損失が理論的限界性能の達成を阻んでいる。

■ 相界面科学によるエネルギー超高効率利用の実現

種々のエネルギーキャリアが相界面で輸送・変換される際の現象素過程の解明、およびその不可逆損失を最小化するための設計科学を推進することが必要である。

■ マルチディシプリン・マルチスケールテクノロジー研究による技術革新

様々な学術ディシプリンの連携・融合によって、ナノからマクロまでのマルチスケール現象の最適化・制御を可能とし、最終製品にまで確実に反映させることによって技術革新が達成される。

図 2 本提案の内容

2. 研究投資する意義

2. 1 グリーン・イノベーションへの貢献

平成 23 年度科学・技術重要施策アクション・プラン⁽¹⁾ や第四期科学技術基本計画⁽²⁾ にも指摘されているように、イノベーションの実現において基礎研究と応用開発研究との連携がますます重要となってきた。たとえ商用化に近い技術であってもその競争力を維持するためには、例えば理論限界を追及するための機構解明や革新材料などの基礎研究にも継続した投資が必要であることは論をまたない。既に他国に先んじている研究はその優位性をさらに高めるとともに、新規な研究テーマも地道に発掘・育成してゆく長期的な研究開発ポートフォリオを維持することが重要である。

これまでもエネルギー技術に対しては経済産業省を中心に多くの国家プロジェクトが実施され、現在も精力的に推進されている。しかし、実用化への貢献が第一に問われる経産省プロジェクトにおいては、直接の貢献が見えにくい基礎研究については、その重要性は認識されつつも研究リソースの配分が十分とは言えないのが実情である。一方、そうした基礎・基盤研究の担い手として科学研究費補助金への期待もあるが、社会的期待の明確な目的研究の受け皿としては必ずしも十分ではなく、結果として、我が国のエネルギー分野における基礎研究は貧弱なものとなっている。長期的な視点で着実に基礎・基盤研究を推進することが人材育成の観点からも重要で、優れた研究者なくしては製品開発でもいずれ競争力を失う懸念があり、ここにも国が研究投資する意義がある。現象素過程の全容解明や、計測・解析手法等を含む基礎・基盤研究については、欧米を中心に継続的な支援が投下されている。エネルギーに関わる目的基礎研究を強化することが、我が国が長期的な競争力を保ち、グリーン・イノベーションを実現するための必要条件である。

エネルギー機器やシステムにおいて、相界面での力学的、化学的、あるいは電磁気学的な現象は、その機能や効率を支配する共通の本質的な素過程となっていることから、相界面現象を解明し、設計するための基礎研究こそ、エネルギーに関わる目的基礎研究そのものと言っても過言ではない。相界面科学の高度化、すなわち、その素過程の現象解明、およびその不可逆損失を最小化するための設計（最適化、制御）科学を推進することが、第四期科学技術基本計画に盛り込まれたグリーン・イノベーションを幅広く推進するための着実な方途といえる。

コラム 1 地球規模課題解決のための基本戦略とは

地球上のすべての人々が永続的に繁栄していくためには、地球環境保全、経済発展、エネルギー安定供給の互いに相反する三つの課題をバランス良く解決することが必要となる。このためには、化石資源への依存度の低減が基本的な方向であることは間違いがないが、化石資源が最も安価な一次エネルギー源であり、現在の文明がこの利用の上に成り立っている事実を考えれば、この問題の解決には多大な努力と長い時間が必要であることも十分認識しておく必要がある。原子力と再生可能エネルギーのみで1次エネルギーを賄うことが達成可能な低炭素社会といえるが、現時点で我が国だけが突出して理想状態へのハードランディングを目指しては、逆に国家破綻のリスクを高める可能性がある。また、我が国の2007年におけるエネルギー起源CO₂排出量の世界全体へ占める割合は約4%であり、今後ともその割合は減少が続く。つまり、我が国だけでCO₂排出削減対策を進めても、地球温暖化抑制効果は限定的であることは明らかである。このような中、我が国が長期的に繁栄し、世界のエネルギー問題に真の意味で貢献し続けるためには、我が国を将来にわたって支える中長期的な基幹産業を定め、これを強化し、その高い省エネ・新エネ技術を世界全体へ、特に今後消費の拡大が見込まれる途上国へ確実に普及させるための研究開発戦略を持つことが最も重要である^(3, 4)。

2. 2 社会のロバスト性向上に寄与するエネルギー基礎研究開発

我が国の場合、社会的、経済的活動が、諸外国や国際関係の擾乱に対して非常に脆弱な体質となっており、ロバスト性が損なわれていることが大きな課題である。またコラムに解説するように、エネルギー問題は特定の画期的なブレークスルー技術だけですべてが解決するような性格のものではなく、様々な技術による総合戦略をもって解決すべきことはたびたび指摘されている。上記の総合戦略を研究開発に照らせば、省エネ・高効率化・再生可能エネルギー等あらゆる技術を俯瞰し、その貢献度や普及時期を見据えて研究開発投資の優先順位付けを行い、競争力を高めておく必要があるといえる。

また、本質的かつ共通基盤的な基礎研究を推進すれば、製品技術ごとの研究開発を並列させる場合よりも技術開発環境の擾乱への対応は比較的容易となり、かつ重複も避けることができ、長期的に研究成果を活かす上でも有利であるといえる。本戦略プログラムで取り上げた相界面現象は様々なエネルギー機器において、エネルギーを伝達・変換する上で本質的に重要な役割を果たしている。様々なリスクを想定し、エネルギー問題へのロバスト性を高めるためにも、この相界面現象に対する深い理解と高度な設計・制御技術の研究開発が極めて重要となる。長い歴史を持つエネルギー研究に奇策はない。地に足の着いた相界面に関わる共通基盤的基礎研究を、応用開発研究、製品開発、普及推進と連携しつつ、長期的な視点で着実に推進することが、我が国の持続的科学技术競争力に貢献する道である。

なお、相界面現象はエネルギー利用に限らず、社会の様々な生産消費活動に関わっている。従って、相界面科学の知見は他分野にも広く転用できる共通基盤的なものであり、その波及効果は目に見えない領域にまで及ぶものと期待される。

2. 3 エネルギー相界面学理の構築と新技術の創出

相界面は、ナノ・メソ・マクロのマルチスケールにおける構造の各階層に存在する。つまり、ナノという単位から、実際のエネルギー機器でのスケールに至るまでの要素研究に加え、それらを接続し融合する統合化研究が本質的に重要となる。このようなマルチスケール現象を対象とする科学技術を総合的に扱うためには、従来の学術ディシプリンの枠を越えた学術の連携と再構築が必要である。これまで、材料系、化学系、機械系、電気系、物理系、数理系といった学術体系ごとにほぼ閉じた研究者コミュニティが形成され、学会活動なども展開されてきた。そうした体制の中で、企業研究者や応用研究者を中心に太陽電池、蓄電池、燃料電池等の特定の製品技術を対象とした学会がさらに個別に設立されるなど、これらコミュニティを越えた研究交流は活発ではなかった。

本提案により、様々な専門を持つ基礎研究から応用研究までの研究者が、エネルギーを目的に結集し、密接に連携、協働するインセンティブを与えることができる。関連学術分野の進歩を促すだけでなく、従来の学術体系の壁を越えたマルチディシプリンによるマルチスケール学術体系の構築が期待できる。

コラム2 エネルギー問題に貢献する技術とは

エネルギーセキュリティを担保し、活力ある、そして持続可能な低炭素社会を実現することは決して容易な道ではない。世界全体が持続型社会にソフトランディングし、我が国がその中で重要なプレゼンスを発揮するためには、諸外国の動向も含めて精査し、いつまでにどのような技術を重点的に推進すべきなのか、そのために必要となる研究は何か等について十分に吟味する必要がある。例えば、新エネルギー技術の場合、グリッドパリティに到達することが大前提となるのはもちろんであるが、稼働率や素材調達等の制約条件も考慮した上で目標量のエネルギー供給が可能か否かの検討が重要となる。さらには、技術開発が市場拡大期に間に合うのか、技術がコモディティ化した状態でも我が国が産業競争力を保てるのか等の視点も重要である。

近年の資源価格の高騰により、我が国の燃料輸入額はこの10年で激増しており、2007年度および2008年度は20兆円超、リーマンショック後の2009年度においても15兆円を超えている⁽⁵⁾。輸出製品価格への転嫁はこの円高局面では事実上かなり困難であり、90年代よりも毎年約10兆円多い富が国外に流出し続けていることになる。エネルギー安全保障、経済成長、環境保全のトリレンマ⁽⁶⁾を解決する唯一の方法は、経済合理性に基づいた手法で化石エネルギー使用量を減らすことである。このとき重要となるのは、大きな量的貢献が見込めるかということと、従来技術に対してコスト競争力があるかという二つの視点である。経済合理的で膨大な量が見込めれば、国富の流出を防ぎ産業競争力を向上させることができるだけでなく、CO₂排出削減やエネルギー安全保障にも貢献できる。

図3に、2050年に世界のエネルギー関連CO₂排出を2005年比で半減させるというIEA Energy Technology PerspectivesのCO₂排出削減BLUE Mapシナリオ⁽⁷⁾を示す。エンドユースでの改善が53%、CO₂の回収・貯留（CCS）を含めた火力発電で24%、原子力と再生可能エネルギーが23%の貢献割合を占めている。量とコストを考慮するとおおよそこのような結果となる。図4には、同じくBLUE Mapシナリオによる再生可能エネルギーの普及プロセスを示す⁽⁸⁾。水力、バイオマス、風力、太陽熱発電（CSP）、地熱、太陽光発電（PV）、潮力の順で普及が進んでゆくシナリオが想定されており、再生可能エネルギーだけを見ても、導入される技術は非常に多岐にわたる。日本が高い技術力を有する火力発電の技術が活かせる太陽熱発電や地熱発電が、比較的早い時期から立ち上がってくることも注目に値する。

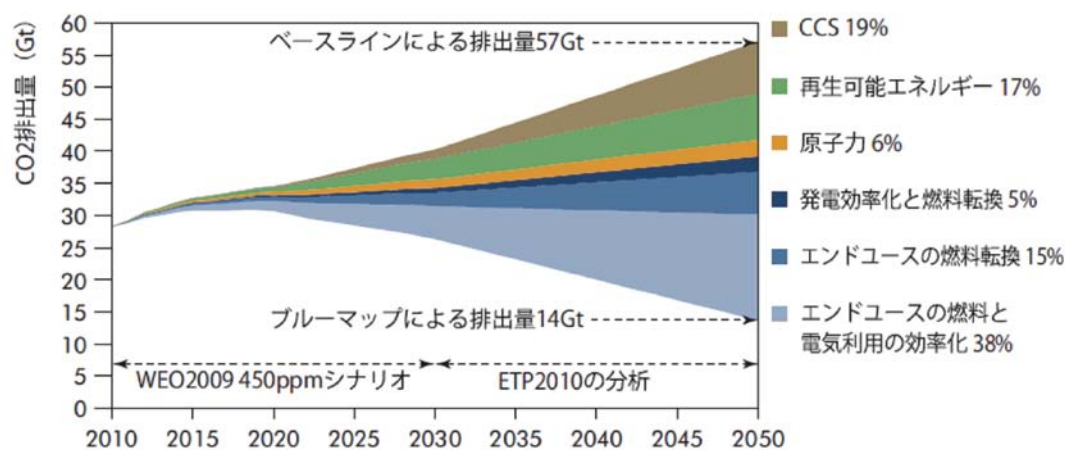
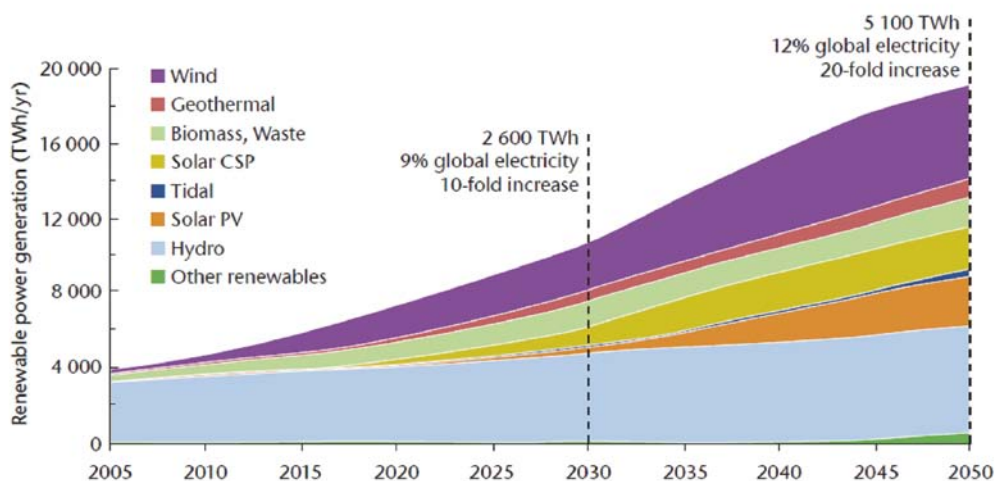


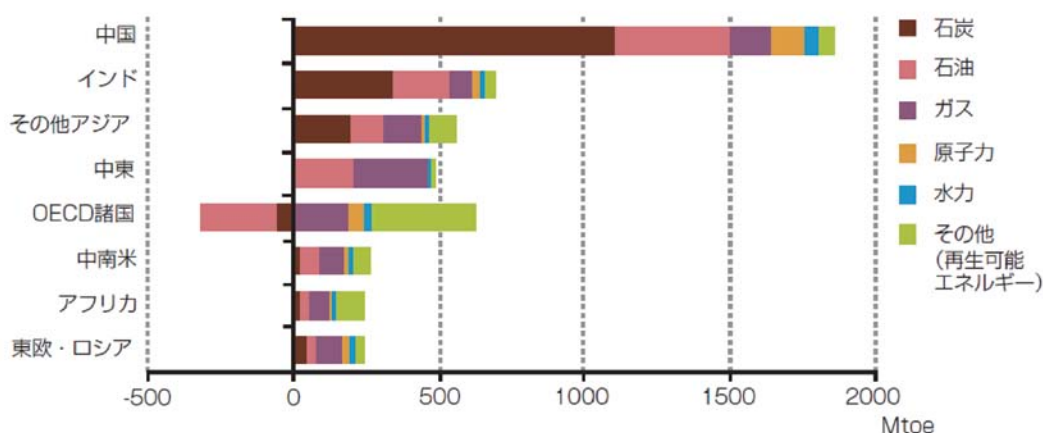
図3 IEA Energy Technology Perspectives BLUE Map シナリオによるCO₂削減の主要技術⁽⁷⁾



Source: IEA (2008a).

図4 IEA BLUE Map シナリオによる再生可能エネルギーの発電電力量予測⁽⁸⁾

(現状の需要成長率で推移した場合の 2007～2030 年の増減)



※その他にはバイオマス、廃棄物、風力、地熱、太陽光・熱、潮力・波力が含まれる
(出所) IEA [World Energy Outlook 2009]

図 5 世界エネルギー需要の増減の見通し⁽⁹⁾

図 5 に、2030 年までの世界のエネルギー需要の増減の見通しを示す⁽⁹⁾。OECD 諸国の増加量は小さく、需要増加のほとんどは途上国である。しかも、増加分のほとんどが石炭、石油、天然ガスの化石資源である。現在の日本の 1 次エネルギー供給量が年間約 560 百万石油換算トンであることから、この増加量がいかに膨大であるかが分かる。我が国にとって、この増加を抑制する革新技术を世界に先駆けて開発し普及させることが、今後 20 年程度のスパンでは最も重要な使命となろう。

このように、エネルギー問題は、特定の画期的な代替エネルギー技術だけですべてが解決するような性格のものではない。エネルギーに関わる研究開発においては、基礎研究であってもその貢献度や達成時期など全体戦略との関連性を常に意識しておく必要がある。

3. 具体的な研究開発課題

エネルギー技術に現れる相界面での力学的、化学的、あるいは電磁気学的な現象は、機器の機能や性能を決定する鍵となっている。そして、エネルギー技術の理論的最高性能(限界性能)の実現を阻む損失の多くはこの相界面で生じている。そこで、相界面でのエネルギーキャリア(原子、分子、化学種、イオン、電子、光子、フォノンなど)の輸送や変換プロセスの解明、および相界面を最適化、制御、製造するための設計に対する基礎・基盤研究課題に取り組む必要がある。相界面科学を推進する上で共通する研究アプローチは、以下のように三つに大別できる。

アプローチ1：非理想状態も含めた相界面現象プロセスおよび素過程の解明

- ・ エネルギーキャリアのフロー(伝導、拡散、放射、蒸発、昇華、化学反応、電荷移動、溶解、凝固、析出、散乱・反射等)
- ・ 界面形態(2相/3相界面、p/n接合、ショットキー接合、ヘテロ界面、量子ドット等)
- ・ 非理想状態(欠陥、不純物、劣化、酸化、エロージョン・コロージョン、摩耗、変形、ファウリングなど)

アプローチ2：相界面を最適化、制御、製造するための設計技術の開発

- ・ 界面構成物質の選択、界面モルフォロジー(形状、キャビティ、微粒子、薄膜、コーティング、多孔質等)、反応過程、界面変形性能(弾性、粘弾性)などの多変数の最適化
- ・ マルチスケールのエネルギーキャリアフローの制御による損失低減

アプローチ3：上記1、2を支える計測技術とモデリング・シミュレーションの高度化

- ・ ミクロ、マクロの素過程現象、それらの機構を解明するための計測技術
- ・ 素過程のモデリングに基づく、マルチフィジックス、マルチスケール現象の数値シミュレーション、数理科学

以下、代表的なエネルギー機器と、その効率改善の鍵を握る相界面科学の具体的な研究開発課題例を挙げる。

■複雑な熱流動制御による熱機関の極限的効率向上

エネルギー変換の大半を担う各種エンジンや火力発電プラント等の熱機関の不可逆損失のほとんどは、熱移動に伴う温度差と、圧縮・膨張行程の流動損失による。その熱交換損失や流動損失を大幅に低減し、システムの理論的限界性能への到達度を向上させ、大幅な低コスト化を達成するために、乱流や沸騰などの気体/液体/固体相界面のミクロからマクロまでの熱物質輸送の素過程を解明し、形状や表面性状の最適化や制御を行う。

■輸送機器の摩擦抵抗削減による省エネルギー／温暖化ガス排出削減

大幅な CO₂ 排出削減を課せられる運輸部門は、自動車はもちろんのこと、我が国の総排出量に無視し得ない割合を占める海運も視野に入れねばならない。これらの機器の大幅な抵抗低減を達成し、省エネルギー、CO₂ 排出削減、製品競争力を向上させるために、乱流や二相流の気体／液体／固体界面での複雑流動を解明、設計する。

■断熱材のナノ・メソ・マクロ構造最適化による大幅な断熱性能向上

低コストで施工性の良い優れた民生用断熱材を実現し、最も削減が困難とされる民生部門の大幅な省エネルギー化に貢献するために、ナノ・メソ・マクロの構造最適化を行い、平均分子自由行程よりも小さな微小空隙を有し、固相間熱抵抗が大きく、ふく射を抑制した多孔質構造を最適化する。

■相界面伝熱・物質交換・相分離技術の高度化によるヒートポンプの革新

世界のトップランナーとなった空調機やヒートポンプの、さらなる効率増加や機器のコンパクト化、冷媒使用量削減を達成するために、素過程現象の解明に基づいた革新的な伝熱相界面、物質交換相界面、相分離相界面の最適設計と新たな製造技術を開発する。

■分離膜の構造の詳細解析および孔径・相界面形態の高性能化

多種の水処理用分離膜の飛躍的な性能向上と低コスト化のために、分離膜における液体／固体相界面の機能と形態を最適設計するための基盤研究、すなわち精密な膜構造の解析や表面性状や孔径の制御技術を開発する。

■燃料電池や蓄電池等の電極界面反応機構解明および相界面形態の最適化

蓄電池や燃料電池の飛躍的な性能向上と低コスト化のために、マイクロ多孔質電極内のガス、イオン、電子の拡散と電気化学反応の現象解明を行い、高度なシミュレーションや先端計測技術により新規材料の提案、および多元系多孔質電極の固体／固体／気体の相界面形態の最適化等を行う。

■パワー半導体デバイスのヘテロ界面制御による高効率化

SiC、GaN 等のワイドギャップ半導体素子を用いた電力制御用集積回路や LED および半導体レーザ等のヘテロ界面におけるキャリア輸送損失を大幅に削減するために、科学原理に基づく元素選定、および界面形成プロセスの体系的な基礎研究を行う。

コラム3 相界面での不可逆性と相界面コンダクタンス

エネルギー技術における損失の多くは相界面で生じている。図6に、多くのエネルギー機器で共通な、エネルギーポテンシャル差と相界面コンダクタンス（エネルギーの伝わりやすさを比例係数で表した数字）の関係を示す。図中の実線はエネルギー移動量が一定の線であり、線上の点と縦軸横軸で囲まれた長方形の面積がエネルギー移動量を表す。同じエネルギー移動量で不可逆損失（ポテンシャル差）を減らすためには、実線上の左上から右下へ動くこと、つまり横軸の値である界面コンダクタンスと面積の積を増加させることが必要になる。例えば伝熱を例に考えると、熱移動量 Q を維持しつつ温度差 ΔT を低減させるためには、コンダクタンスである熱伝達率 h と伝熱面積 A の積 hA を増加させる必要がある。このうち面積増加はコスト増加につながるため、通常はコンダクタンスを大幅に増加させることが求められる。逆に、放熱ロスを減らしたいときは、断熱、すなわちコンダクタンスをできるだけ小さくして、同じ温度差におけるエネルギーの移動量そのものを減らすことになる。このように、エネルギー機器の不可逆損失を削減するためには、界面コンダクタンスを自在に設計・制御することが求められ、そのためにそこで生じる現象を深く理解する必要がある。ここで界面の制御には、固相の表面改質による性状最適化、凹凸形状や吹出し吸込み等による流れ制御、電極等における多孔質構造最適化、気液界面や火炎面（気気）の最適化等、様々な方法が想定される。

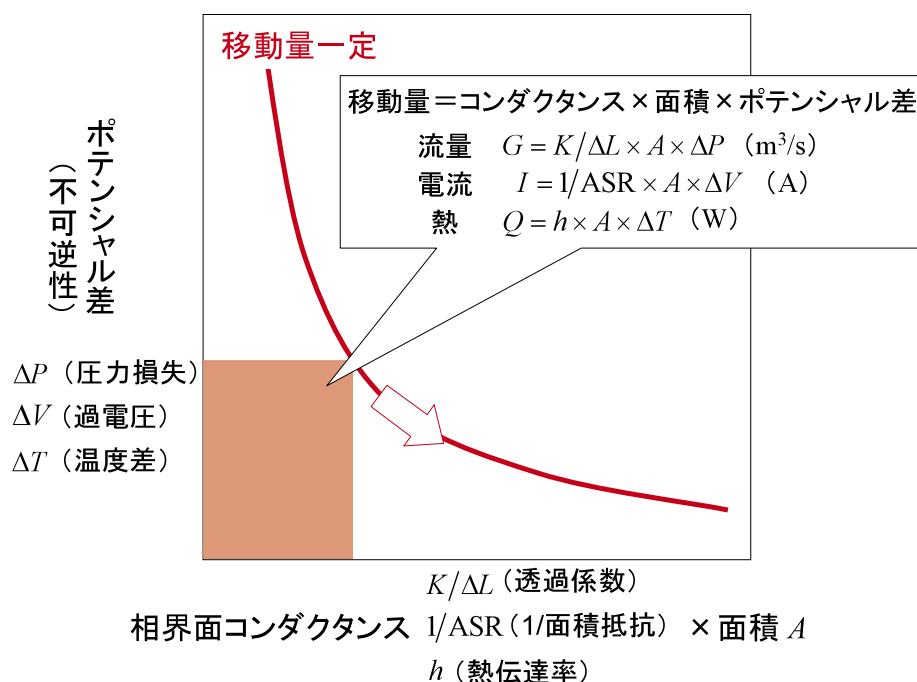


図6 不可逆性と相界面コンダクタンス

コラム 4 相界面の種類とスケール

図 7 に、様々なエネルギー機器の界面とそのスケールを示す。このように、相界面には固体／液体／気体の様々な相間において、原子レベルからシステムまで様々なスケールのものが存在し、電子、イオン、フォノン、光子、化学種等の様々なエネルギーキャリアの輸送および変換が伴う。

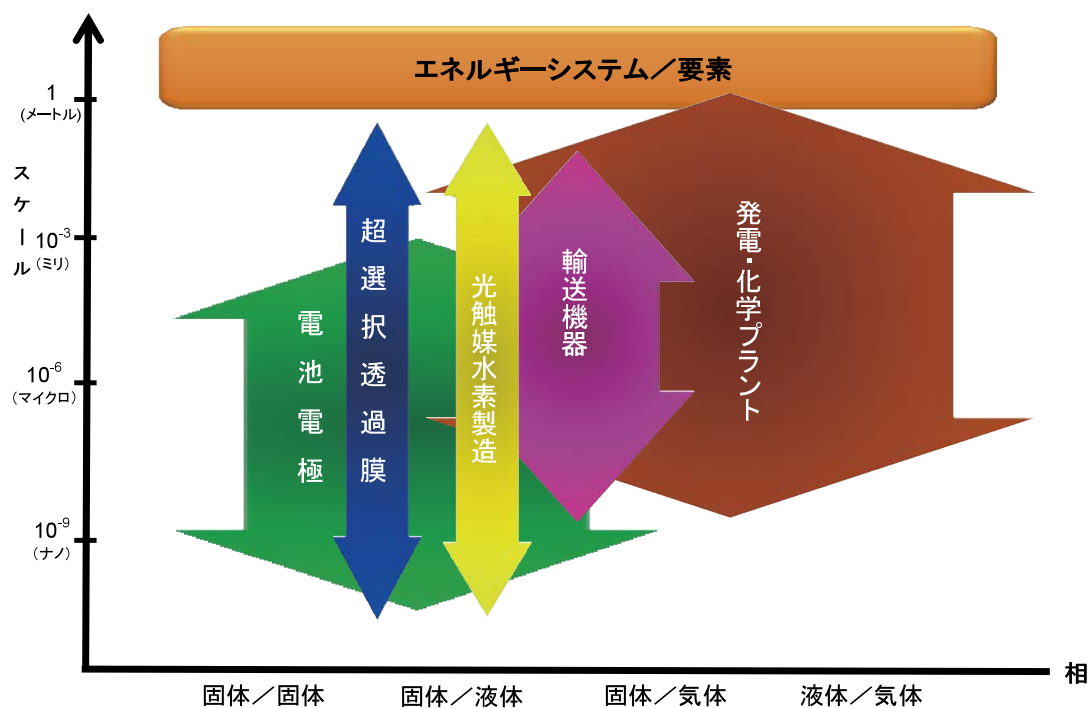


図 7 相界面の種類とスケール

4. 研究開発の推進方法

相界面はナノ・メソ・マクロスケールにおける構造の各階層に存在することから、各スケールにおける要素研究に加え、それらを連携・融合するための研究が本質的に重要となる。つまり、ナノという単位から、実際のエネルギー機器でのスケールまでを想定した推進方法と体制が重要である。また、最適化においては設計点だけでなく、機器・システムのような様々な運転条件、劣化挙動等も含めて検討することが重要である。このようなナノからマイクロ、マクロまでのマルチスケール現象を総合的に研究するためには、分野横断的に異なる学術分野の研究者が組織的に連携する仕組みを設計する必要がある。材料系、化学系、機械系、電気系、システム系、さらには物理系、数理系の研究者が、エネルギーの超高効率利用を目的に結集し密接な連携を図ることによって、新たなブレークスルーが期待できる。役割分担に関しては、主として物理系の研究者は新規な計測技術等のアイデアを出し、化学系研究者は材料や反応機構解明を行い、機械系研究者はこれらの知見を具現化するためのモデル化やシミュレーションを担い、数理系研究者が最適化を行うといった分担が想定されるが、それぞれが学術ディシプリンを越えて有機的に連携、役割分担する協力体制が欠かせない。

従来の学術体系で括られた学会や、特定の製品技術を対象とした学協会での活動だけでは、目標とする研究開発を推進することは難しい。本質的な課題の抽出とブレークダウン、評価指標や成果の受け渡しなどで局所最適に陥らないように配慮する必要がある。また、理論と実験、大学人と企業人、若手からシニアまでの世代間連携といった複数の視点でバランス良く研究組織を構成することが望ましい。そして、これらの組織体制を実現するには、優れた統括力と指導力を有する研究統括者を招く必要があることも留意せねばならない。

さらに、相界面科学の成果は、具体的な技術に、そして最終的には量産プロセスに反映されなければならない。このため、実製品の要求機能や、資源的・環境的制約条件を、基礎研究の早い段階からフィードバックできる仕組みが不可欠である。特に、産業界の研究者とのパイプを構築して情報交換を行う、あるいは広い視点でステアリングする運営委員会を構成するなど、適切な研究推進体制を組んで、社会ニーズを基礎研究の課題設定に適宜フィードバックすることが望まれる。

また、国内だけではなく、海外の有能な人材を積極的に参画させることも、極めて重要である。国際的な研究環境で切磋琢磨することは、特に若手研究者の創造力や挑戦力を育むために役立つといえる。こうして、高度の専門知識と多様な価値観を併せ持つ多分野の研究者が、物理的に近い空間に集まり、分野間の壁を越えて日常的なコミュニケーションを行い、研究目的と日々の成果を共有し、相界面の現象解明、機能設計、そして最終的なシステム開発までをシームレスにつなげる研究開発の成功体験を積むことが肝要である。

このようなエネルギー分野における基礎・基盤研究を強化するためには、本来、文部科学省、経済産業省、環境省、国土交通省等の省庁をまたぐ一体的取り組みが望ましい。また、最終的な技術の受け皿である産業界とも情報共有と意見交換が望まれる。基礎・基盤研究力において、長期的に競争力を失うことの無いよう、オールジャパンで戦略的・組織的・継続的に取り組む必要がある。

5. 科学技術上の効果

様々な相界面の形成、そこにおけるエネルギーキャリアの振る舞いについては、これまで各分野で多くの知見が蓄積されてきた。しかし、相界面が生み出す特異な物理挙動や新たな機能については、基礎科学的に不明な点が多い。それは、微細スケールにおける計測の限界、あるいは現象の強い非線形性、複雑性、そして異なる物理現象のカップリングなどによる。本戦略プログラムで提言する先端的な知のフロンティアとしての相界面の科学への総合的取り組みを通じて、新しい相界面機能の発見や創造、理論的に予測される最大機能の達成条件の解明など、新しい科学の構築が期待される。

現在の工学は、ナノという単位から、実際のエネルギー機器までの 10^{12} にも及ぶテラスケールバンドを統一的に扱うことはできない。すなわち、得られたナノスケールの科学的知見を工学として、エネルギー問題解決に実効ある形に具現化するための理論や高度な解析手法が不足している。例えば、相界面現象は、過酷な温度、圧力、酸化還元雰囲気下で、かつ気・液・固の混相において、非常に複雑な場で進行し、現象解明が困難なものが多い。本戦略プログラムによって、複雑な現象の解明に向けたダイナミックな in-situ 分析手法や、工学的最適化のための解析・シミュレーション技術の進展が期待される。

さらに、現在の速度論的知見の多くにおいては、反応場の物理的な構造と反応機構の両効果が混在し、分離できていない場合が多い。最適構造を見出して具体的に設計するためには、両者を分離して定量化することが必要である。また、界面での欠陥や不純物等が全体的性能に大きく影響する場合が多い。つまり、構造を定量化する際には欠陥の影響を、反応機構には不純物の影響を考慮する必要がある。そこでは、メソスケールの形態変化や輸送現象を扱うシミュレーション手法の開発や、最適化の評価関数の設定や最適化プロセスの数理科学的手法等が研究課題となる。本戦略プログラムは、基礎・基盤研究への長期的かつ継続的な取り組みの成果として、具体的な設計・製造の科学としてのシミュレーション技術と最適化技術を創出し、関連科学分野の進展にも寄与することができる。そして、従来の経験やノウハウに基づく製造プロセスを、科学に基づく設計生産プロセスへと革新する、生産の基礎科学の進展にも寄与できると予想される。

さらに、以上のようなマルチスケール現象を対象とする科学技術を総合的に扱うことで、従来の学術ディシプリンの枠を越えた連携が促され、新たな学術として再構築される。従来は、材料系、化学系、機械系、電気系、物理系、数理系といった学術体系ごとに学協会が組織され、その中で企業研究者や応用研究者を中心に太陽電池、蓄電池、燃料電池等の特定の製品技術を対象とした学協会が構成されるなど、必ずしも組織の枠組みを越えた交流は育ってこなかった。本提案により、様々な専門を持つ基礎研究から応用研究までの研究者が、エネルギーを目的に結集し密接に連携することになり、学術ディシプリンの壁を越えた新たな学術体系の構築が期待できる。

6. 社会・経済的效果

政府は、効果的・効率的にエネルギー技術開発を推進するため、Cool Earth・エネルギー革新技術計画を策定している⁽¹⁰⁾。これは下記のⅠからⅢの視点に基づき、図8に示す既存技術の延長線上にない革新的な21種類のエネルギー技術を抽出したものである。2050年に向けて、我が国が総力を挙げて注力すべきエネルギー技術といえる。

Ⅰ 2050年の世界における大幅な二酸化炭素削減に寄与する技術

- (a) 技術の普及に要する時間を考慮し、2030年までには実用化が期待される技術
- (b) 普及に要する時間が短い技術については、2030年以降に実用化が期待されるものも対象とする

Ⅱ 以下のいずれかの方法を通じて、飛躍的な性能の向上、低コスト化、普及の拡大等が期待できる革新的な技術

- (a) 新たな原理の活用、既存材料の新活用を含めた材料の革新（例：新構造・新材料太陽電池、燃料電池の白金代替触媒等）
- (b) 製造プロセスの革新（例：水素を還元材として用いる革新的製鉄プロセス等）
- (c) 要素技術が確立した技術をシステムとして実証（例：二酸化炭素回収・貯留技術）

Ⅲ 日本が世界をリードできる技術（要素技術について強みを要する技術を含む）



図8 Cool Earth・エネルギー革新技術計画で取り上げられた21の革新技術⁽¹⁰⁾

これらの革新技术において、相界面の科学が大きく貢献し得る。例えば、力学的な相界面は、①高効率天然ガス火力発電、②高効率石炭火力発電、④先進的原子力発電、⑬省エネ住宅・ビル、⑯超高効率ヒートポンプ等において本質的な役割を果たしている。化学的な相界面には、③二酸化炭素回収・貯留（CCS）、⑧燃料電池自動車、⑨プラグインハイブリッド自動車・電気自動車、⑩バイオマスからの輸送用代替燃料製造、⑪革新的材料・製造・加工技術、⑫革新的製鉄プロセス、⑮定置用燃料電池、⑰高性能電力貯蔵、⑲水素製造・輸送・貯蔵が深く関係する。固体物理学的な相界面は、④革新的太陽光発電、⑥超電導高効率送電、⑭次世代高効率照明、⑰省エネ型情報機器・システム、⑳パワーエレクトロニクスに関係する。このように、これら革新技术のすべてにおいて、相界面の科学による設計技術や製造プロセスの革新が大きく寄与するものと予想される。

こうした相界面科学の成果の結果として実現するエネルギー革新技术の、世界のエネルギー問題への貢献も大きい。図9は、2050年に世界のCO₂排出を半減させるために必要となるエネルギー革新技术の寄与度を示す⁽¹¹⁾。既存技術の普及による貢献が40%、革新技术の寄与が60%となっており、革新技术の貢献が不可欠であることがわかる。革新技术のうち、火力発電と原子力がそれぞれ12%、太陽光発電が7%、産業・民生・運輸部門の省エネ・効率改善が合計で30%となっている。これらの多くのエネルギー技術の着実な発展のために、相界面の科学は基盤的な役割を果たすはずである。

先述のIEAのBLUE Mapシナリオによれば、その実現のためには、2030年までの世界全体の年間投資額として約7,500億米ドル、2030年から2050年においては1兆6,000億米ドルが必要とされており⁽⁷⁾、極めて大きな投資額が予想されている。供給サイドにだけでなく、自動車、家電、重工業プラントなど、特にエネルギー消費者によってなされる需要サイドへの投資も含まれている。既に述べたように、エネルギー供給側、需要側に限らず、エネルギー技術における損失はすべてエネルギーの変換、輸送、貯蔵プロセスにおける不可逆性が原因であり、それらの多くは相界面で生じている。従って、この損失を

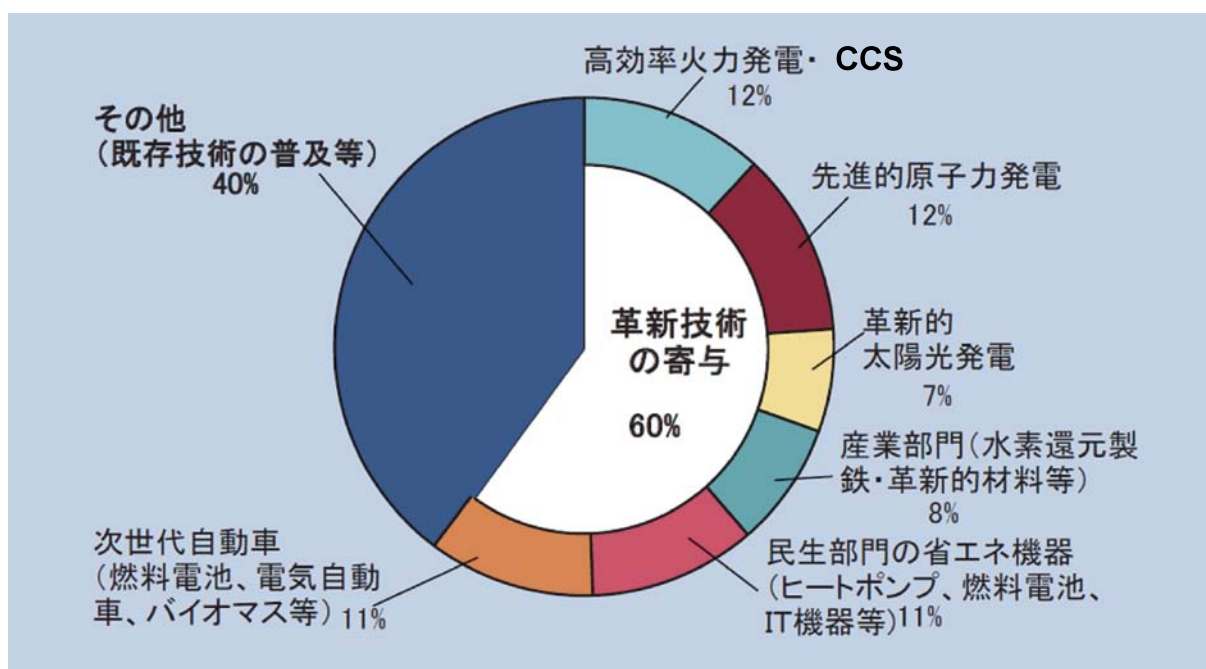


図9 世界のCO₂削減へのエネルギー革新技术別の寄与度⁽¹¹⁾

大幅に削減する相界面の科学の推進によりもたらされる技術革新の、社会的、経済的効果は極めて大きいと予想される。

広い技術を対象にそれらの不可逆損失の発生源である重要な相界面現象を抽出し、その高度化のために相界面の科学に関する基礎研究に注力することで、世界のエネルギー問題に真に貢献し、かつ我が国の持続的な成長に寄与することができる。現在までに、多くのエネルギー関連研究開発が政策的に推進されてきたが、それらの個別技術課題の研究開発に加えて、エネルギー高効率利用を実現する上で最も本質的、かつ共通基盤的な課題としての相界面の科学を推進することで、長期的な我が国の科学技術競争力を確保することができる。こうした目的基礎研究を、応用研究、製品開発、エネルギー政策とオールジャパンで一体的にかつ戦略的に推進することで、上記の大きく拡大する市場を先導することができるとともに、世界のエネルギー問題への貢献が可能となる。

7. 時間軸に関する考察

本戦略プログラムで提言する「相界面の科学」は、産業界あるいは既に何らかの公的セクターで着手されている個別技術研究開発とは対照的に、エネルギー技術の革新に共通する課題解決を支える基礎・基盤研究であり、具体的な出口技術を特定して時間軸に設定することにはなじまない。すなわち、相界面の科学の進展は、既存の、あるいは今後開発されるエネルギー技術を徐々に改善し、あるいは不連続な飛躍をもたらして、最終的に具体的な形としての応用製品として社会に普及、貢献することになる。この点に留意しつつ、期待される研究開発の時間的な進展について、以下に述べる。なお、各技術の限界性能値とおおよそ予測される達成値を挙げるが、これらの性能改善幅の大半は、相界面現象の最適化、制御を含めた科学的な論拠に基づく設計技術によって初めて実現されるといえる。図 10 に技術課題の研究開発フェーズの推移の概要を示す。

輸送機器や熱機関等の主要なエネルギー機器の現在の性能は、理論限界に遠く及ばない。例えば火力発電を例に考えると、メタン理論火炎温度のカルノー効率¹⁾は 87% であるのに対し、現在の最新鋭コンバインドサイクルをもってしても発電効率は 59% にとどまる。相界面の科学の貢献によって、今後 10 ～ 20 年において、10 ～ 15% の効率向上がもたらされると予想される。これらの技術は、わずかな改善でも大量の導入量が見込めるため、エネルギー問題への貢献は極めて大きい。

航空機、船舶、高速車両、自動車などの輸送機器は、水平移動である限り原理的にはエネルギー消費を必要としないが、機器の内外の界面現象、例えば流体抵抗や摩擦抵抗のために多大なエネルギー消費を伴っている。例えば、流体抵抗を生む乱流の全容解明と制御法の開発により、2015 ～ 2025 年で航空機・船舶で 10 ～ 20% の流体抵抗の低減が可能となると期待される。

相界面科学は、各種空調機・ヒートポンプ内の相界面伝熱・物質交換・相分離の高度化に寄与し、さらなる効率向上や機器のコンパクト化、冷媒使用量削減の達成に寄与する。現在、商用化されているエアコンの成績係数の最高値は 7 以下である。限界性能値は約 30 であり、今後 10 ～ 20 年で 10 から 13 程度への改善が達成されると予想される。ヒートポンプ温水器の場合は、現在の最高値は 5 程度、今後 10 ～ 20 年で 7 ～ 8 へ改善がもたらされると予想される。

再生可能エネルギー等の新規技術については、相界面を含む技術原理の革新により今後大幅な改善が成される。燃料電池や蓄電池等の電極界面反応機構や劣化機構解明の解明、相界面形態の最適化によって、蓄電池や燃料電池の飛躍的な性能向上と低コスト化が可能となると予想できる。メタン使用の燃料電池の発電効率限界性能は 90% を超えるが、現状では、固体酸化物形 (SOFC) で約 40%、固体電解質形 (PEFC) で約 35% に留まる。今後、5 ～ 10 年で、それぞれ 50 ～ 60%、40 ～ 45% への改善が期待できる。

Li イオン電池をはじめとする二次電池では、効率改善はエネルギー密度向上やコスト削減につながる。相界面での電気化学反応プロセスの革新により、今後 10 ～ 20 年で、エネルギー密度が 2 ～ 5 倍、コストが約 1/10 以下となることが期待される。

太陽光発電の理論的最大変換係数 (AM1.5G 照射下) は Shockley - Queisser 限界²⁾で与えられ、33.7% (多接合構造の場合 86%) であるが、現状は 19.0% (モジュール効率)、

21.6%（セル単体）、そして多接合型（3 接合）で 35.8%に留まる。量産可能な材料やプロセスを用いた上で、いかにこれらの最高性能に近づけられるかが課題である。相界面での光電変換プロセスの最適化により、火力発電並みの発電コストを実現しつつ、単接合型で 25%以上（セル単体）、そして集光多接合型（3 接合）で 40%以上の性能が、2030 年頃までに達成されると期待される。また、2020 年頃までに化合物型太陽電池や有機太陽電池など新規材料の太陽電池の効率が、現状の太陽電池性能を凌駕し、普及するフェーズに入るものと考えられる。

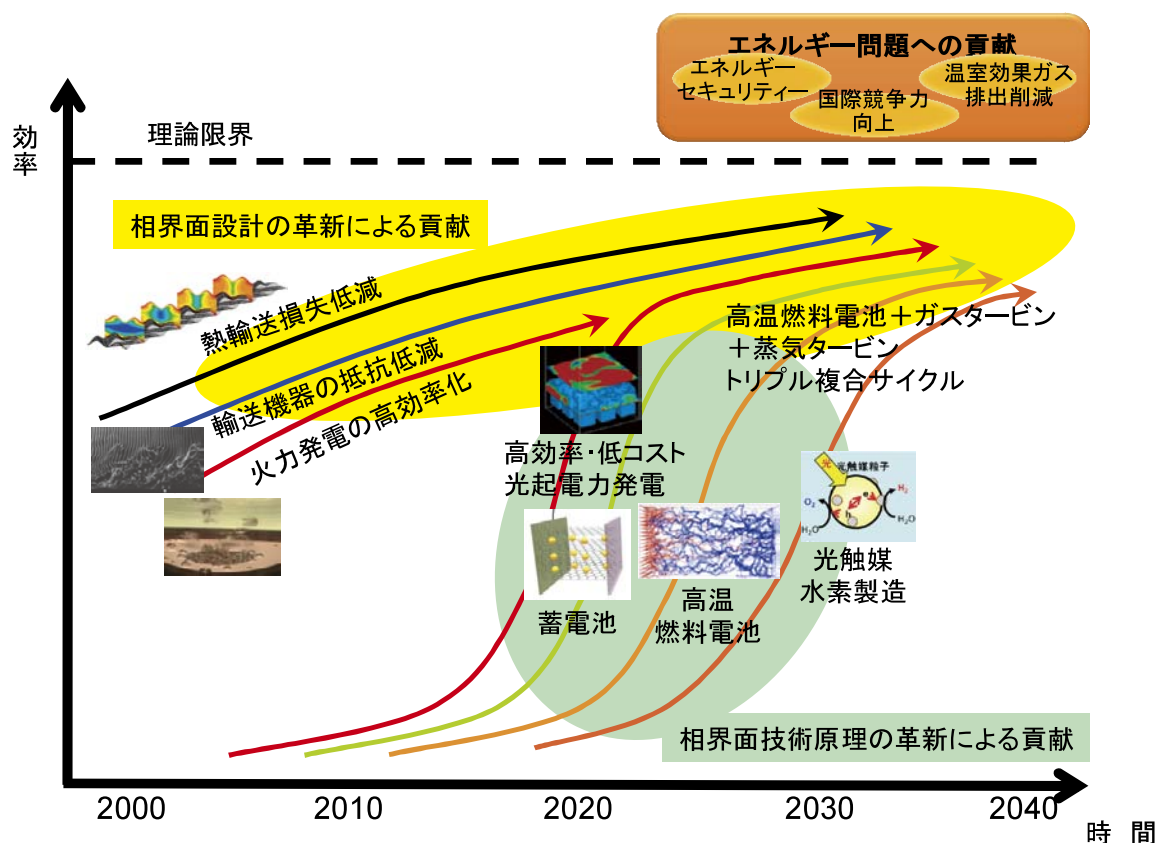


図 10 技術フェーズと時間との関係

コラム 5 1次エネルギー供給の見通し

途上国を中心に当面の間、化石資源は重要なエネルギー源であり続ける。一方で図 11 に示すように、我が国の場合、2030 年頃から再生可能エネルギーが 1 割程度導入されてくることが想定されている⁽¹²⁾。このような観点から、我が国がリードするエネルギー技術の競争力を継続的に強化するための基礎研究と、その先にある低炭素社会での技術優位性を確保するための基礎研究を、時間軸を踏まえてバランス良く推進すべきである。

原油換算
百万kL

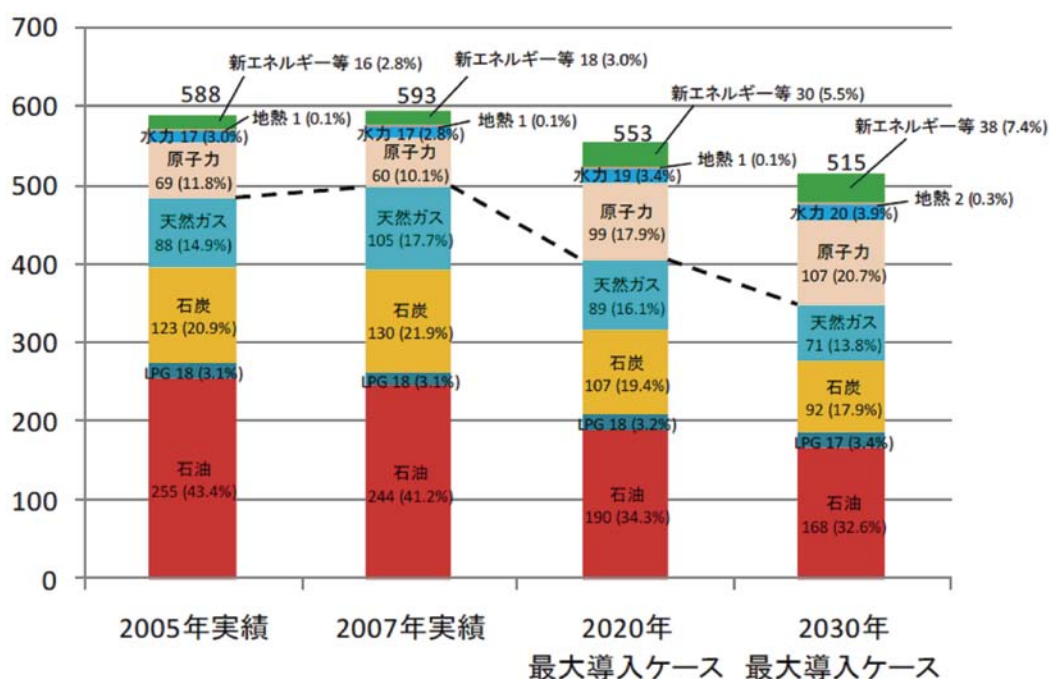


図 11 我が国の一次エネルギー供給の推移見通し⁽¹²⁾

8. 検討の経緯

研究開発戦略センター（CRDS）では、科学技術に対する社会の期待を、全体として「豊かな持続性社会の実現」と定義し、①健康、②生物多様性、③持続可能なエネルギーシステム、④持続可能な物質循環、⑤共通基盤事項（基礎・基盤科学、人材、グローバル化対応等）の5つを重要項目として掲げている。また、温室効果ガスの排出削減やエネルギーセキュリティは、我が国の最重要課題の一つであり、ブレークスルーをもたらすような研究成果が強く求められている点も重要視している。

CRDSは、政府が打ち出した「新成長戦略」あるいは「第4期科学技術基本計画」に盛り込まれたグリーン・イノベーションは、我が国がリスクを回避して世界に貢献するためには避けて通れない道であり、その道をたどる上で科学技術が重要な役割を果たすものと理解している。そして、環境（Environment）・エネルギー（Energy）・経済（Economy）の3Eを同時克服し、さらには生物多様性や人類の衡平性にも配慮する必要があると認識している。去る平成22年6月には、エネルギー政策基本法に基づくエネルギー基本計画⁽³⁾が3年ぶりに改訂された。同計画はエネルギー安定供給の確保、環境への適合、市場原理の活用を基本方針としているが、改訂版では、特にエネルギー安定供給へ高まる懸念、さらなる温室効果ガス削減の必要性、そしてエネルギー・環境分野の経済成長牽引役としての期待が指摘されており、CRDSでもこうした国の目標を達成するための目的基礎研究のあり方を議論してきた。

これまで、CRDSでは、資源的制約や海外展開を考慮した技術開発の重要性⁽⁴⁾、基礎・応用や学術ディシプリンの壁を乗り越えた研究開発の重要性⁽¹³⁾等について発信してきた。さらに、上記のエネルギー分野の科学技術動向や各省庁の研究資金制度の現状を踏まえ、グリーン・イノベーションを推進する基本的姿勢を検討してきた。その結果、エネルギー環境問題の特質である量とコストを常に考慮しつつ、国際動向を俯瞰した上で、時空間的に見た全体最適戦略を狙うべきこと（特に、短期的な目標と長期的な目標を切り分けた議論が必要）、原理原則に基づいた技術目標を設定して研究を推進すること、研究拠点や研究グループ間が連携してネットワーク活動を推進することを推奨し、それによってこそ最終的に我が国の持続性と競争力に貢献できると認識するに至っている。なお、対象技術としては、新規エネルギー利用技術の開発と共に、既存技術においてもエネルギー利用の究極的な高効率化が必須であり、いずれも我が国は高い競争力を保有しているが、諸外国も急速にキャッチアップしてきていることを踏まえ、限られた研究リソースを戦略的に投資する必要があると理解している⁽¹⁴⁾。

この間、関連分野の専門家へのヒアリングなどを重ねつつ、今後国が取り組むべき目的基礎研究課題の抽出作業を継続してきた。その結果、重要課題のひとつとして、相界面現象の限界性能の達成のために、その全容を見極め、損失低減、最適設計・制御技術の開発研究を推進するべきという基本認識を得た。すなわち、エネルギーを利用する様々な機器やシステムにおける相界面現象の基礎学理や制御・最適化技術を深化させることによって、相界面での不可逆損失を飛躍的に減少させ、また新規機能を発現する相界面プロセスを発見・創造することによって、将来の我が国の、あるいは世界の持続的エネルギー利用に大きく貢献できると考えるに至った。相界面科学の発展によって、開発目標となってい

る新技術や既存の基盤技術の飛躍的性能向上と低コスト化が可能となり、それらの広範かつ迅速な社会普及と産業振興を達成する道が開かれるものと期待される。

このような認識に基づき、平成 22 年 8 月 20 日、21 日の 2 日間にわたってワークショップ「エネルギー高効率利用社会を支える相界面の科学」を開催した⁽¹⁵⁾。表 1 に参加した専門識者リストを示す。二日間にわたる事例紹介と討論を通じ、相界面現象に関わる活発な意見交換が交わされ、相界面におけるエネルギーの輸送と変換が、実システムでのエネルギー輸送やエネルギー変換において、その機能や効率を決定する共通の本質的素過程となっていること、相界面の分析と設計の科学は、エネルギー問題解決のために極めて重要であるとの認識を再確認した。

また、ナノメートルでの現象解明や材料研究の成果を、マクロな実システムに活かすためには、 10^{12} にも及ぶ幅広いスケールバンドを統合的に扱うことが必要であり、現象解明や材料開発に強い化学系研究者と、機構実現に優れた機械系研究者の連携と融合が特に欠かせないことが指摘された。材料系、化学系、機械系、電気系、システム系さらには物理系、数理系の研究者がエネルギーを目的に結集して密接に連携し、現象解明のための計測・解析技術の高度化、スケール間をつなぐ数学的モデリングと数値シミュレーション技術の開発、数理科学的手法による最適化技術等を高度化すべきであるとの意見が出された。これらのワークショップの結論は、本戦略プログラムの基本的考え方や課題設定に反映されている。

表1 ワークショップ参加者リスト

氏名	所属	役職
話題提供者		
高田 保之	九州大学大学院工学研究院	教授
花村 克悟	東京工業大学大学院理工学研究科	教授
江口 浩一	京都大学大学院工学研究科	教授
堂免 一成	東京大学大学院工学系研究科	教授
本間 格	東北大学 多元物質科学研究所	教授
宮崎 康次	九州工業大学工学研究院	准教授
大宮司 啓文	東京大学大学院新領域創成科学研究科	准教授
古山 通久	九州大学 稲盛フロンティア研究センター	教授
有識者（コメンテータ）		
橋本 和仁	東京大学大学院工学系研究科	教授
久保田 純	東京大学大学院工学系研究科	准教授
河野 正道	九州大学大学院工学研究院	准教授
大久保 陽一郎	株式会社豊田中央研究所 試作開発部	次長
栗原 優	東レ株式会社	顧問
深淵 康二	慶應義塾大学理工学部	専任講師
加藤 孝久	東京大学大学院工学系研究科	教授
相界面科学チームメンバー		
笠木 伸英	JST 研究開発戦略センター 環境・エネルギーユニット	上席フェロー
鹿園 直毅	JST 研究開発戦略センター 環境・エネルギーユニット	特任フェロー
上野 潔	JST 研究開発戦略センター 環境・エネルギーユニット	フェロー
渡辺 正裕	JST 研究開発戦略センター ナノテクノロジー・材料ユニット	フェロー
鈴木 至	JST 研究開発戦略センター 環境・エネルギーユニット	フェロー
JST 関係者		
宮下 永	JST 研究開発戦略センター 環境・エネルギーユニット	フェロー
丸山 浩平	JST 研究開発戦略センター 環境・エネルギーユニット	フェロー
福田 佳也乃	JST 研究開発戦略センター 環境・エネルギーユニット	フェロー
河村 誠一郎	JST 研究開発戦略センター ナノテクノロジー・材料ユニット	フェロー
伊東 義曜	JST 研究開発戦略センター 電子情報通信ユニット	主任研究員
石原 聡	JST 研究開発戦略センター ナノテクノロジー・材料ユニット	フェロー

9. ワークショップで紹介された研究開発課題例

第3章において、具体的な研究開発課題例を紹介した。本章では、現在の相界面に関わる最先端研究の例として、平成22年8月にCRDSで開催したワークショップ「エネルギー高効率利用社会を支える相界面の科学」⁽¹⁵⁾で取り上げられた研究課題を紹介する。なお、エネルギー問題を解決するために必要となる相界面現象は下記の例だけに限られたものではなく、今後の技術の進展に応じて様々な相界面現象を扱う科学への要請が生じるものといえる。

9. 1 表面性状改質による伝熱促進

高効率熱機関や熱利用機器では、低温度差でいかに多量の熱を輸送できるかが鍵を握るが、そのためには熱伝達率（コンダクタンス）の増加が最も重要となる。伝熱には、伝導、対流、ふく射の三形態があるが、その中でも特に沸騰や凝縮のような気液相変化を伴う現象は非常に熱伝達率が大きいという特徴がある。気液相変化における重要な研究テーマの例として、界面の濡れ性の制御により超親水から超撥水までを広範囲に制御する技術の確立が挙げられる。そのためには、濡れ性に関する基礎学理の構築が必要となる。例えば、限界熱流束に関しては実験式が提案されているものの、濡れ性の影響は考慮されていない。また、このような現象のミュレーション技術が重要である。現在のシミュレーションでは、気泡の発生から離脱までのマルチスケールの問題は完全には解かれておらず、モデル化や実験による補正が必要である。特に、分子動力学から連続体をつなぐ領域での予測手法が不足しており、そのスケールのシミュレーション技術が必要である。さらには、相界面の構造や濡れ性等を積極的に制御する技術が必要だと考えられる。超撥水面と超親水面の組み合わせで、新たな機能発現も可能である。これは熱だけではなく、材料化学や表面化学の研究者が協調すべき分野である。（九州大学、高田保之教授）

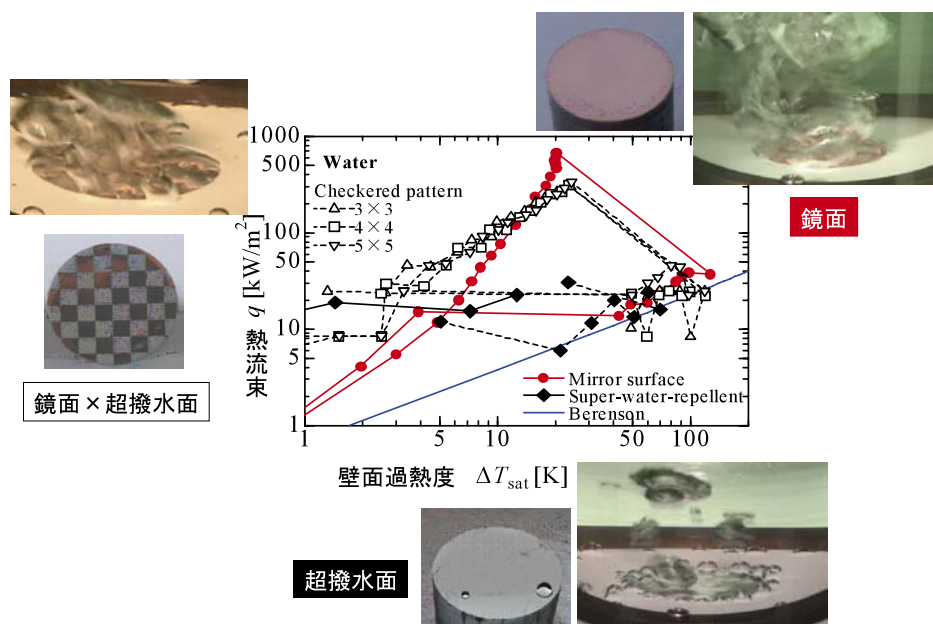


図 12 濡れ性の制御による伝熱促進

9. 2 熱ふく射による光電変換

熱ふく射で行う光起電力発電は、光起電力発電の一種ではあるが、太陽電池のように可視光を変換するのではなく、主として、赤外線を電力に変換するものである。赤外線放射体表面近傍に存在するエバネッセント波は非常に強度の強い電界強度を持つことがあり、それを電力に変換できると非常に高い密度で出力が得られる可能性がある。また、エバネッセント波自身もマイクロキャビティによって波長コントロールができる可能性がある。つまり、エバネッセント波をマイクロキャビティ等で波長コントロールした上で、ナノギャップまで近づけて発電をさせることで高いエネルギー密度の発電が実現できる可能性がある。このような近接場光の利用を実現するためには、物体と光電変換素子の面間距離を近づける必要がある。これには技術的な困難を伴うが、変換できるエネルギー量は非常に大きなものとなる。(東京工業大学、花村克悟教授)

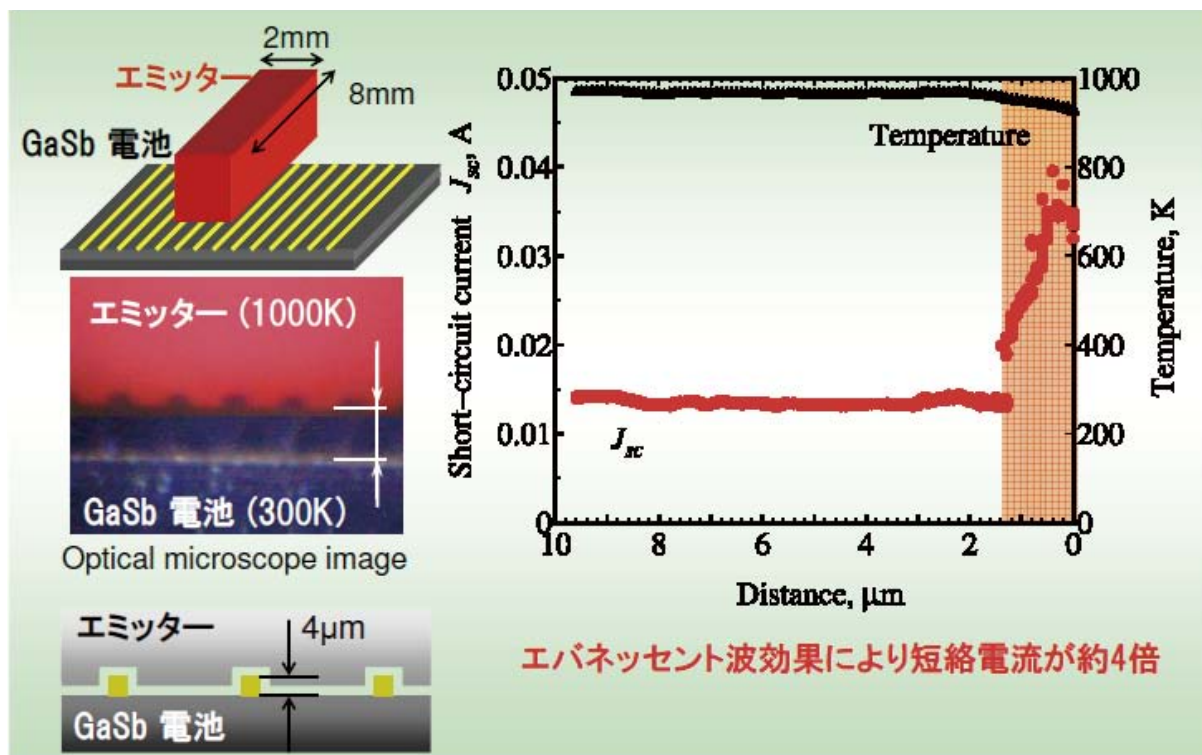


図 13 熱光起電力発電への近接場光効果

9. 3 燃料電池電極

燃料電池は、化学エネルギーから電気エネルギーに直接変換するシステムであるが、電極界面での化学反応や物質移動が鍵であり、相界面技術の集大成といえる。固体高分子形燃料電池 (PEFC) の白金電極触媒では、燃料中に含まれる一酸化炭素 (CO) によるアノード触媒被毒が大きな問題となっている。白金をカーボンの代わりに酸化スズで担持した触媒では、CO の酸化活性が高いことが明らかになっている。白金/酸化スズ触媒は特異な CO 吸着が見られ、酸化還元によって白金粒子周囲に金属間化合物が生成し、構造が可逆的に大きく変化することがわかってきた。これらの界面での構造変化と耐 CO 被毒性の向上に対して、さらなる研究が必要である。

固体酸化物型燃料電池 (SOFC) では、イットリア安定化ジルコニア (YSZ) とニッケルを混合させた燃料極が用いられるが、その 3 次元構造と反応機構についてそれぞれを別個に評価することが求められる。電子伝導パス、イオン伝導パス、気体拡散、および三相界面での電気化学反応についての定量的な検討が必要である。また、失活前後の電極の構造変化を解析することで、失活や水蒸気耐性などの原因を調べる必要がある。(京都大学、江口浩一教授)

定電流通電試験 : 0.2 A/cm² @1000°C

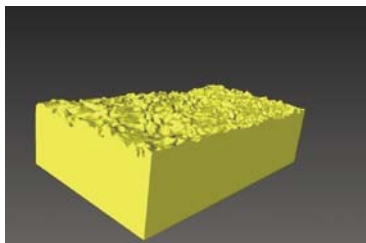
Anode : Ni-YSZ (Ni:YSZ = 47:53 vol.%), Cathode : (La_{0.8}Sr_{0.2})_{0.97}MnO₃

Electrolyte : YSZ (thickness: 500 μm)

Anode gas : 97% H₂-3% H₂O, Cathode gas : O₂

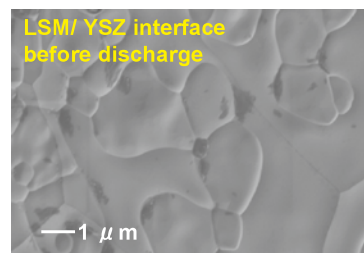
FIB-SEMIによる3次元構造計測

After discharge
(300 min)

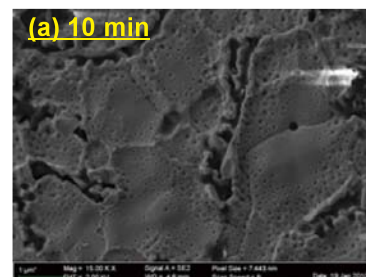


LSM

YSZ



(a) 10 min



(d) 300 min

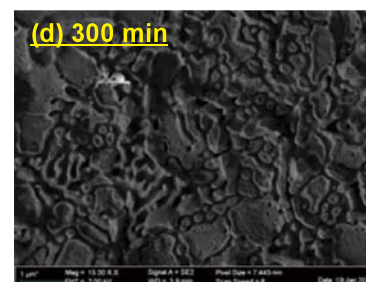


図 14 SOFC 空気極 (LSM) と電解質 (YSZ) 界面の劣化評価

9. 4 不均一系触媒および光触媒

光触媒を利用した太陽光の水分解による水素製造は日本独自の技術であり、高い評価を得ているが、近年、諸外国において巨額の研究投資が行われており予断を許さない。太陽エネルギーで人類が使用しているエネルギーを賄うためには、数 10 平方キロメートルの受光面積のプラントを数万か所に建築する必要がある。太陽電池など製造プロセスが高価なものは、このような大規模な応用には必ずしも向いていない。光触媒は粉を水に懸濁させたただけか、板やフィルム上に塗布しただけのものから水素を製造できるので、大規模展開に有利である。また、エネルギーの貯蔵や輸送、化成品製造を考えると、太陽エネルギーを化学エネルギーへ直接変換して化学物質を作り出すことには深い意義がある。これまでの光触媒は酸化物を中心としたもので、紫外光でしか水分解できないものであったが、窒化物である GaN と ZnO の固溶体光触媒が可視光で水を分解する最高活性の光触媒であることが見出されている。適切な表面修飾等によりさらなる変換効率向上が期待されている。(東京大学、堂免一成教授)

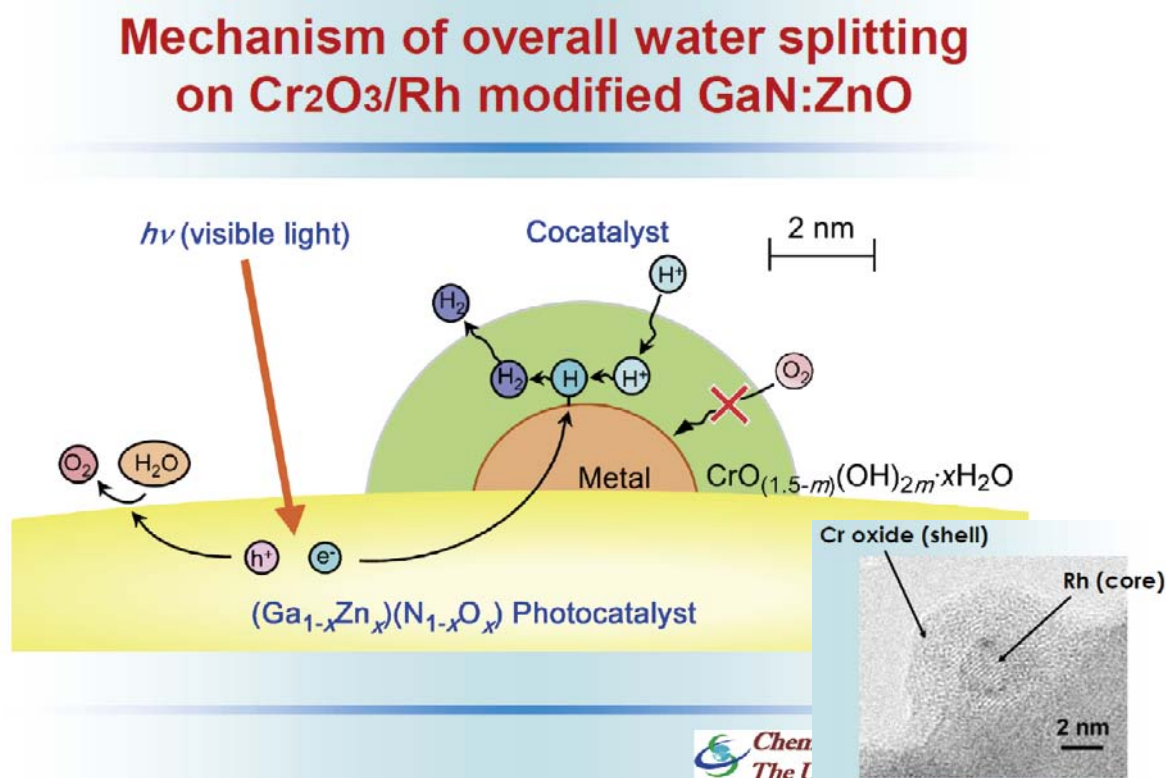


図 15 水素製造光触媒上の助触媒反応機構

9. 5 二次電池電極

二次電池の性能指標として重要となるのは、エネルギー密度、パワー密度、サイクル特性、信頼性、安全性、低コスト等であり、さらに希少金属を使わないという観点も元素戦略上非常に重要である。リチウムイオン電池における最も重要な相界面は、主に電極表面と電解質の接する界面であり、化学的な視点と物理的な視点双方からのアプローチが重要である。

最近、固体の硫黄が通常の電極に比べて 10 倍程度容量が大きいということで、非常に期待されている。反面、固体の硫黄は絶縁体であり、電極反応速度は非常に遅い。従って、最近の研究例ではメソポーラスカーボンという非常に被表面積の大きいナノ構造カーボンに硫黄を担持し、固体と固体の界面の面積を増やすことによって電極反応速度を上げ、硫黄を何とか使いこなそうというような試みがある。硫黄は自然界に多く存在し、安価ということで、実際にナトリウムサルファー電池は実用になっている。

相界面の物理的なアプローチに注目すると、電極と電解質の間にできる高抵抗の界面層の原因を、イオンの化学ポテンシャル差を起源とする空間電荷層モデルを使って解析し、高抵抗層の抑制に結びつけた例がある。化学者が意外と気づかない物理的なアプローチで問題解決の糸口がつかめることがある。近年、人工的なナノ空間構造材料を電極に応用し、イオン伝導度を飛躍的に高める研究も盛んになっており、今後の発展が期待されている。(東北大学、本間格教授)

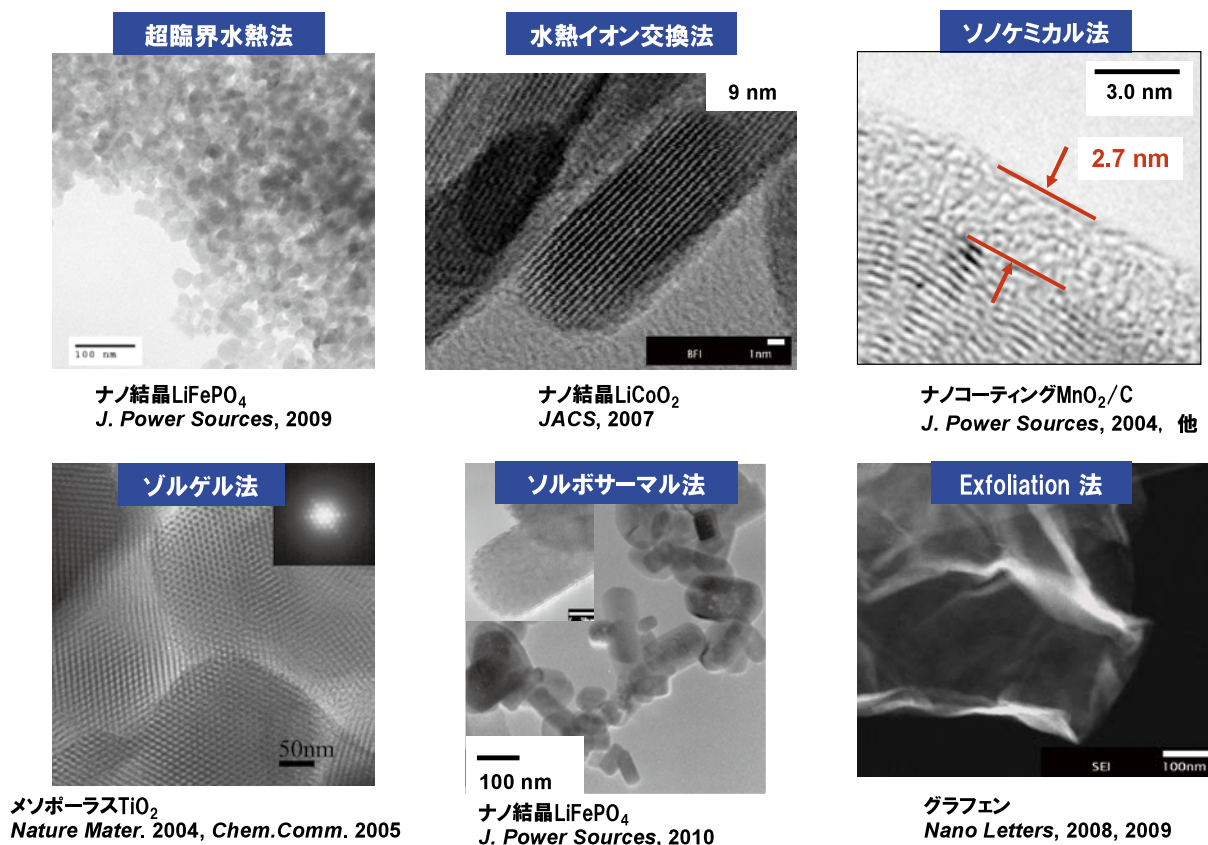


図 16 ナノサイズ電極活物質の新しい合成プロセス

9. 6 熱電変換界面

熱電変換デバイスとは、熱エネルギーを電気エネルギーに変換するデバイスであり、エネルギー再生の観点から高効率な熱電変換デバイスの社会的ニーズは非常に大きい。また、熱電発電は太陽光発電とは異なり、稼働率を 100% とすることも可能であるという特徴を持つ。熱電変換デバイスの効率を反映する性能指数として ZT という無次元数が用いられるが、 ZT を増加させるためには、熱は伝わりにくいが電気は良く通す材料が必要となる。一般に、熱伝導率と電気伝導度は自由電子が共通のキャリアとなるため独立でないが、格子振動の役割は分離できる。つまり、格子振動（熱）に対しては大きな散乱（抵抗）となり、電子には抵抗にならないような構造を実現すれば良い。クラスレートやスキッテルダイト、人工超格子、ナノコンポジットをはじめとする量子ナノ構造が世界中で研究されている。理論的には $ZT = 3 \sim 6$ という報告もあり、これが実現すれば電力用途にも道が開ける可能性がある。ただし、素子全体がナノサイズでは電力量が取れないため、応用上ではバルクサイズにまでスケールアップすることが必須となる。このためには、自己組織化のような方法で材料を構成することが重要である。研究の進展フェーズとしては原理検証段階といえるが、ナノ界面における電子と格子振動の輸送を科学的に解明する基礎科学が極めて重要である。(九州工業大学、宮崎康次准教授)

フォノングラス—エレクトロンクリスタル(PGEC)

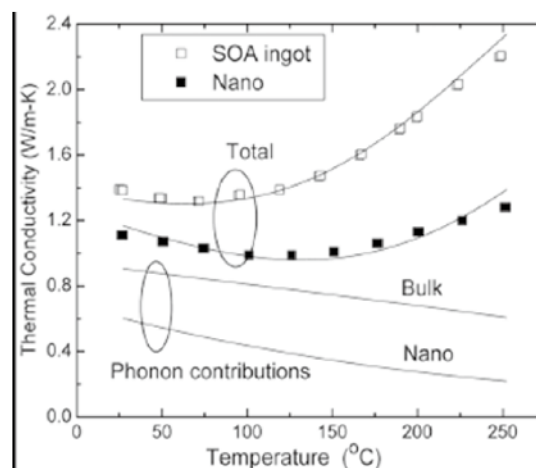
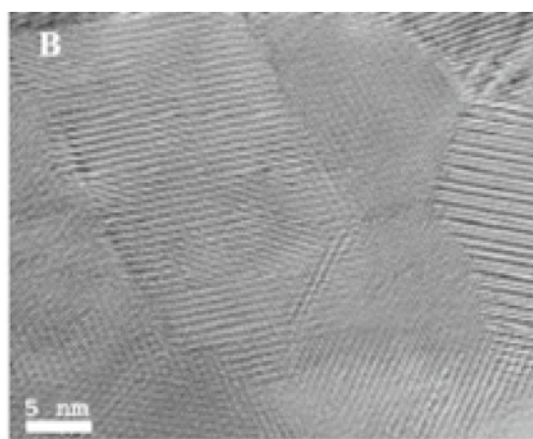


図 17 電子とフォノンのコンダクタンス

9. 7 ナノフルイディクスと吸着現象

ナノスケールの構造を持つ構造体内の流れを扱うには、界面の分子間相互作用や静電力、疎水性・親水性などに基づいたナノ流体工学（ナノフルイディクス）が必要である。逆にこのスケールの空間を利用するとイオン輸送デバイス等の新機能を実現することも可能である。ナノフルイディクスは、ナノからマイクロスケールの構造体を取り扱う際に重要な視点であり、半導体製造、自己集積化など構造体の構築、およびその利用において不可欠である。また、このようなスケールでのシミュレーション技術は分子スケールからマクロスケールまでを含むマルチスケールである必要があり、極めてチャレンジングである。メソポーラス材料には多様なものがあるが、デバイスとして用いるためには向きがそろって、末端から他の末端まで細孔が貫通している必要がある。マイクロチャンネルの中にメソ細孔を配向させメソポーラス材料を構築する手法があり、デバイスとして応用できる可能性が高い。実際にメソポーラス材料の吸着の応用として、デシカント空調への応用が挙げられる。デシカント空調では、吸着材料で空調機のドレインやフロストを吸着・吸収することから高い効率が見込まれる。例えば、通常のヒートポンプ型空調を寒冷地で使おうとするとデフロストにエネルギーが必要である。十分な水の吸着量を持ち、低温でも吸着水が凍らないメソ細孔を利用した吸着材がデシカント空調の吸着材には適しており、細孔径を制御したメソポーラスシリカの吸脱着特性から、デシカント空調機や給湯器に最適なものを見出せる。（東京大学、大宮司啓文准教授）

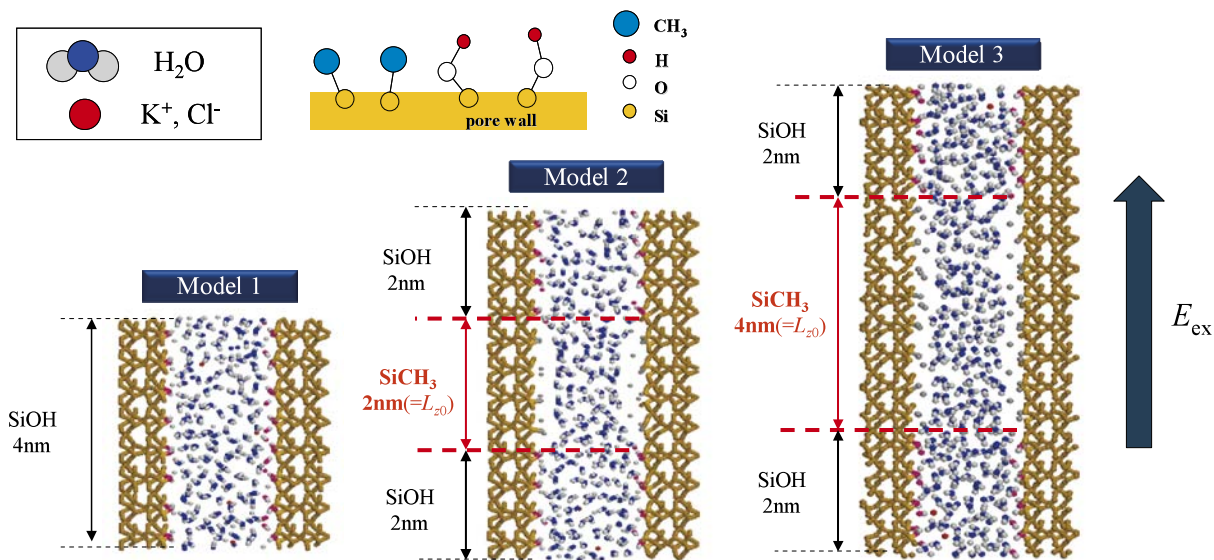


図 18 表面装飾によるイオン輸送の制御

9. 8 電極反応のマルチスケールシミュレーション

固体高分子形燃料電池（PEFC）触媒層の界面は、反応と物質移動が数ナノメートルから数マイクロメートル程度の間で複雑に連成しており、実験から情報を得ることが非常に困難である。数値シミュレーションによって、例えば、白金の上での電気化学反応において、反応のメカニズムは白金と担体間の界面の構造に依存しないが、酸素解離反応速度が異なってくる、といった結果が得られている。一般に、ナノスケールにおいて実験と理論とを対比するのは非常に難しく、実際の原子スケールでの構造が実験的に明らかにされていないことが大きな困難の一つである。これを原子スケールで定義できれば、実験と協働しやすくなる。また、メソスケールの構造の定量化も非常に大きな課題となっている。触媒層の数十ナノメートルからサブミクロンスケール細孔中での液水生成や、液水の制御、白金の溶解や界面プロトン輸送等、解明すべき課題は数多い。

また、固体酸化物形燃料電池では、例えば硫黄のような不純物の影響を明らかにする必要がある。ニッケルへの硫黄の吸着、固溶、浸透、硫黄の炭素の相互作用等の評価を進める必要がある。このようなミクロな計算で様々な反応経路について網羅的に解析し反応シミュレーションを行うことで、マクロな電極反応特性までつなげることができると考えられる。メソスケールの多孔構造と電池特性とを関連付け、多孔質構造を最適化・設計することができれば、他の機械的な特性や耐劣化性等を踏まえて最適設計が可能となる。（九州大学、古山通久教授）

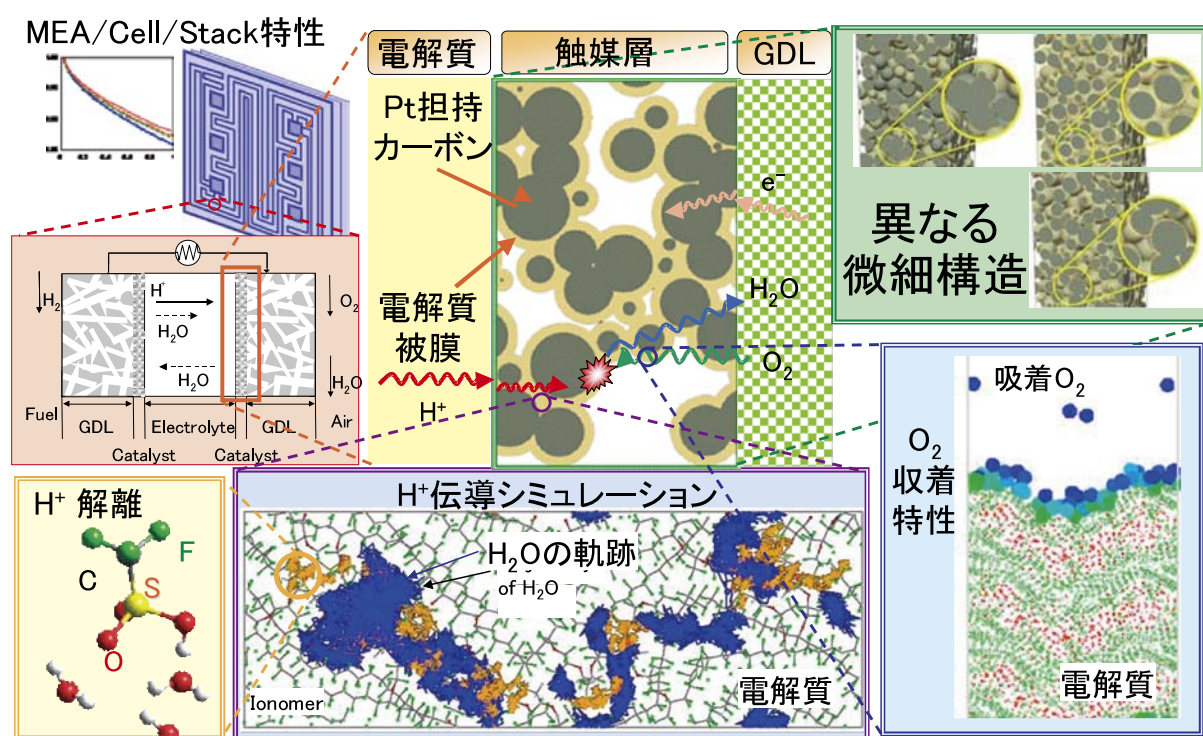


図 19 固体高分子型燃料電池のマルチスケールシミュレーション

9.9 カーボンナノチューブ生成

カーボンナノチューブ（CNT）の特異な性質を利用した様々な応用研究が展開されている。例えば、単層カーボンナノチューブ（SWNT）はその構造により電子物性が変化するから、その構造を制御して CNT を生成することが最も重要な課題となっている。CNT を生成する際に用いる金属触媒と CNT の直径はほぼ同じサイズになることから、触媒のサイズを制御することによる CNT の構造制御が効果的である。SWNT の構造を制御するためには、SWNT を生成するのに適した小さなナノ粒子（直径 1 ～ 2nm）のサイズ選別を行う必要があり、小さなナノ粒子の発生や DMA の分解能向上が鍵を握っている。また CNT の直径と長さを制御することが可能となれば、気相中に存在する CNT のみならず広範なナノワイヤー材料のサイズをオンラインで計測可能となることが期待される。（九州大学、河野正道准教授）

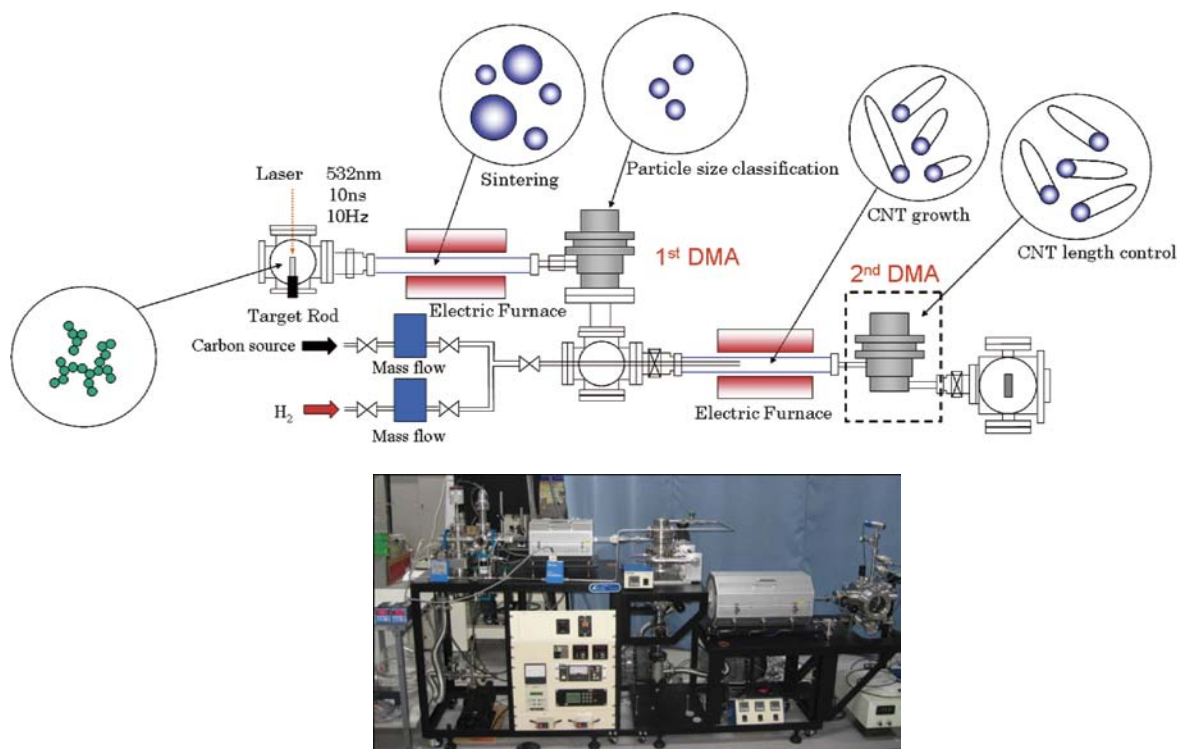


図 20 CNT の径と長さを制御した気相生成プロセス

9. 10 乱流制御

乱流による不可逆損失の発生は、大きくは摩擦と伝熱に由来するものに分けられる。前者は摩擦係数の低減、後者は熱伝達率の促進もしくは断熱という方向で削減が可能である。摩擦低減では、壁近傍のレイノルズ応力を低減することが最重要課題となる。そのための手段として、渦を消すような吹出し・吸込み、流れと逆向きの進行波状の吹出し・吸込み、流れの向きの進行波状壁面変形等が挙げられる。一般に、熱伝達率促進と摩擦抵抗低減は相反する要求であり、大変チャレンジングな課題である。摩擦抵抗を減らし、伝熱を促進するためには、伝熱に関しても摩擦抵抗と同様の恒等式を考慮して運動量および熱の輸送方程式の相似性を崩すことが考えられる。実用化最終段階での一番の問題点はメンテナンスコストの低減であり、そのためには受動デバイスが望ましい。例えば、恒常性や新陳代謝機能を有する機能性界面が作れば非常に効果は大きい。(慶応大学、深淵康二専任講師)

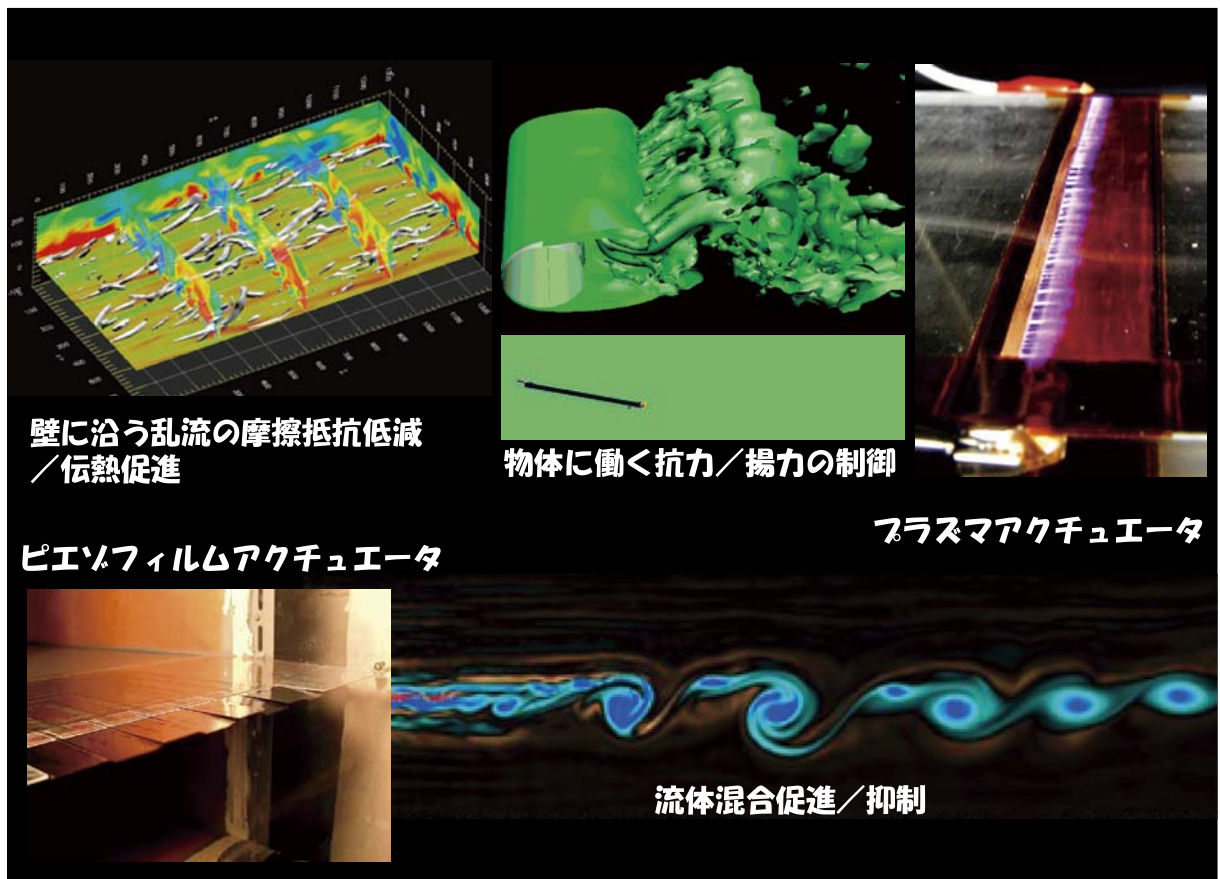


図 21 乱流制御による抵抗低減や混合促進

参考文献

- (1) 平成 23 年度科学・技術重要施策アクション・プラン、総合科学技術会議、
<http://www8.cao.go.jp/cstp/output/20100708ap.pdf>.
- (2) 総合科学技術会議第 95 回配布資料、2010、
<http://www8.cao.go.jp/cstp/siryo/haihu95/siryo1.pdf>.
- (3) エネルギー基本計画、経済産業省、2010、
<http://www.meti.go.jp/press/20100618004/20100618004-2.pdf>
- (4) 戦略提言、二酸化炭素排出抑制技術によって科学技術立国を実現するための 2 つの
戦略的機関設置の提言、CRDS-FY2008-SP-11、2009.
- (5) 財務省貿易統計、<http://www.customs.go.jp/toukei/info/index.htm>.
- (6) 持続型社会に向けたエネルギービジョン、持続型社会研究協議会、2005、
<http://rmo.iis.u-tokyo.ac.jp/jizoku.index.html>.
- (7) IEA Energy Technology Perspectives 2010, IEA,
http://www.iea.org/techno/etp/etp10/Japanese_Executive_Summary.pdf.
- (8) Technology Roadmap Wind Energy, IEA, 2009,
http://www.iea.org/papers/2009/Wind_Roadmap.pdf.
- (9) 平成 21 年度エネルギーに関する年次報告書（エネルギー白書）、経済産業省、資源
エネルギー庁、2009、
<http://www.enecho.meti.go.jp/topics/hakusho/2010/index.htm>.
- (10) Cool Earth - エネルギー革新技術計画、経済産業省、2008、
http://www.enecho.meti.go.jp/policy/coolearth_energy/index.htm.
- (11) 平成 22 年度版科学技術白書、文部科学省、2010、
http://www.mext.go.jp/b_menu/hakusho/html/hpaa201001/1294965.htm.
- (12) 経済産業省、長期エネルギー需給見通し（再計算）、2009、
<http://www.meti.go.jp/report/data/g90902aj.html>.
- (13) 戦略提言、温室効果ガス排出削減に向けた研究開発の推進について、
CRDS-FY2009-SP-04、2009.
- (14) 科学技術シンポジウム、「豊かな持続性社会を実現するイノベーション戦略に向け
て」報告書、CRDS、2010.
- (15) 科学技術未来戦略ワークショップ報告書、高効率なエネルギー利用社会を支える相
界面の科学、CRDS、2011.

■作成メンバー■

笠木 伸英	上席フェロー	(環境・エネルギーユニット)
鹿園 直毅	特任フェロー	(環境・エネルギーユニット)
久保田 純	特任フェロー	(環境・エネルギーユニット)
上野 潔	フェロー	(環境・エネルギーユニット)
鈴木 至	フェロー	(環境・エネルギーユニット)
渡辺 正裕	フェロー	(ナノテクノロジー・材料ユニット)

※お問い合わせ等は環境・エネルギーユニットまでお願いいたします。

CRDS-FY2010-SP-05

戦略プログラム

エネルギー高効率利用社会を支える相界面の科学 STRATEGIC PROGRAM

Phase Interface Science for Energy Efficient Society

平成 23 年 3 月 March 2011

独立行政法人科学技術振興機構 研究開発戦略センター 環境・エネルギーユニット
Environment and Energy Unit, Center for Research and Development Strategy
Japan Science and Technology Agency

〒 102-0084 東京都千代田区二番町 3 番地

電 話 03-5214-7485

ファックス 03-5214-7385

<http://crds.jst.go.jp/>

© 2011 JST/CRDS

許可無く複写／複製することを禁じます。

引用を行う際は、必ず出典を記述願います。

No part of this publication may be reproduced, copied, transmitted or translated without written permission.

Application should be sent to crds@jst.go.jp. Any quotations must be appropriately acknowledged.

ATTAATC A AAGA C CTAAC T CTCAGACC
CT CTCGCC AATTAATA
TAA TAATC
TTGCAATTGGA CCCC
AATTCC AAAA GGCCTTAA CCTAC
ATAAGA CTCTAACT CTCGCC
AA TAATC
AAT A TCTATAAGA CTCTAACT CTAAT A TCTAT
CTCGCC AATTAATA
ATTAATC A AAGA C CTAAC T CTCAGACC
AAT A TCTATAAGA CTCTAACT
CTCGCC AATTAATA
TTAATC A AAGA C CTAAC T CTCAGACC
AAT A TCTATAAGA CTCTAACT
ATTAATC A AAGA C CT
GA C CTAAC T CTCAGACC
0011 1110 000
00 11 001010 1
0011 1110 000
0100 11100 11100 101010000111
001100 110010
0001 0011 11110 000101

