

俯瞰ワークショップ報告書

ナノテクノロジー・材料分野

区分別分科会

**「再生可能エネルギー大量導入時代を見据えた
エネルギー材料・デバイス研究開発」**

2017年12月13日（水） 開催



エグゼクティブサマリー

本報告書は、国立研究開発法人科学技術振興機構（JST）研究開発戦略センター（CRDS）が平成 29 年 12 月 13 日に開催した俯瞰ワークショップ ナノテクノロジー・材料分野 区分別分科会 「再生可能エネルギー大量導入時代を見据えたエネルギー材料・デバイス研究開発」に関するものである。

再生可能エネルギーの大量導入が始まっている。熱、電力などの利用が進むが、本ワークショップでは、再生可能エネルギーの大量導入時代の電力網において用いられるデバイス、材料を中心に検討を行った。コストや電力変動の大きさなど、太陽電池や蓄電池における問題点を解決するために求められる材料、プロセスに関して議論し、共通する課題を抽出することを本ワークショップの目的とした。

再生可能エネルギーの研究開発は 1970 年代から国主導で進められ、太陽電池やレドックスフロー蓄電池など多くの成果が生み出されてきた。本ワークショップでは、議論に先立って過去の研究開発結果の振り返りを行い、これまで 40 年程度をかけて太陽電池などが開発され、実装が進んできたことを確認した。

本ワークショップで議論された内容のまとめを以下に示す。

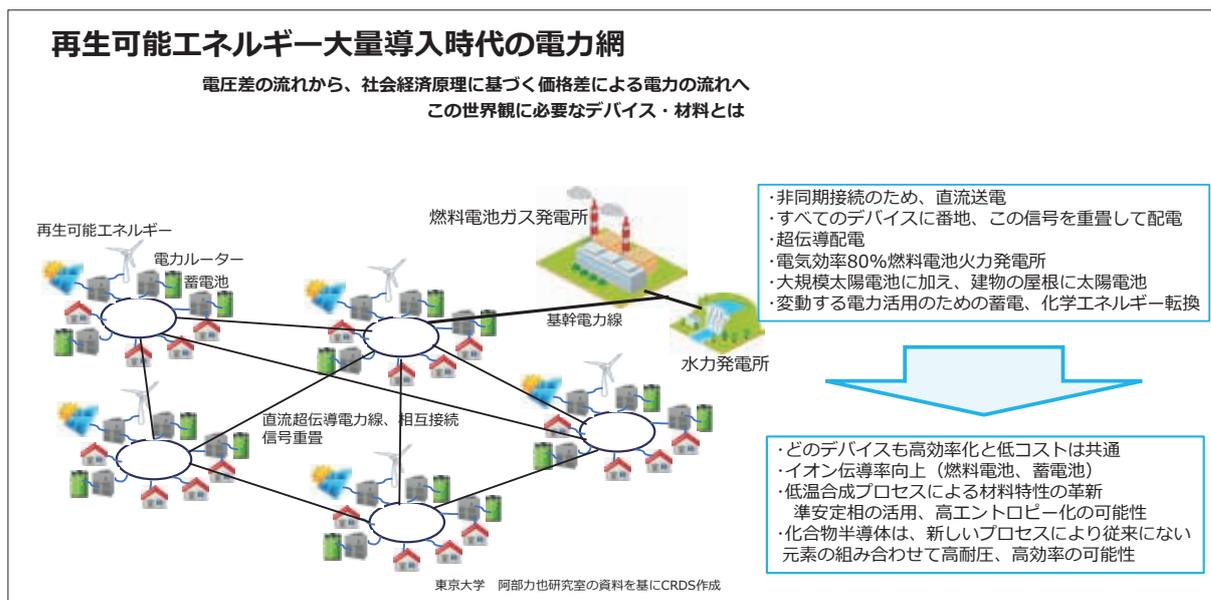


図 0-1

○将来の電力・エネルギーデバイス・システム

将来の電力システムにおいては、再生可能エネルギー由来の電力は変動する一方で、限界コスト 0 を目指すことができる。需要、品質に応じて電力の価格が変化し、これによりインターネットのように双方向接続が可能になる。これは電圧の高低による電力流通から、社会経済原理に基づいた価格差に基づく電力流通に変わることである。

太陽電池、熱電変換、人工光合成は、創エネルギーデバイス・システムとして期待される。太陽電池ではペロブスカイト型の進歩、鉛フリー化、そしてシリコン型とペロブスカイト型の積層による低コスト高効率化が進んでいる。また、太陽電池に用いられる有機薄

膜の形成について、数ミクロンの厚さでも高移動度を実現する新しいプロセスが登場している。熱電変換に関しては、質の悪い熱、すなわち低温から中温度域での熱電物質の特性が近年大きく向上している。これにはフォノン・バンドエンジニアリングが貢献しており、学際的な交流、検討の重要性を示す一例といえる。人工光合成では、可視光での反応の実現が重要であり、二酸化炭素を原料とする有用な有機物生産や、水から直接水素を発生させる反応について効率を今後いかに向上させるかが重要である。

燃料電池については、いかに電気効率 80%を実現するか、耐久性を向上させるかが重要である。電気効率は特に空気極側の材料に課題がある。効率が 80%に達するとガスタービンとのハイブリッドを考える必要がなくなるため、システムとしては簡便になる。

蓄電池については、酸化物固体電解質型と、活物質を電解液とするレドックスフロー型が注目を集めている。酸化物型固体電解質の蓄電池は、電解質のイオン伝導および電解質間、電解質と活物質間の界面が鍵である。界面制御には電場による固体中のイオン移動の理解が重要で、これには固体物理学の助けが求められる。また、高品質な界面形成には原理的に低温での材料合成が必要である。

レドックスフロー型電池は、硫酸を用いるタイプの実用化が主に米国や中国で始まりつつある。一方で、有機材料を用いることや、中性電解液で動作させるなどの新たな展開も提案されており、様々な研究課題があると共に、今後の発展の余地が大きい分野である。

超伝導では、近年、新たな超伝導機構がいくつか示され、今後も新しい発見が期待されている。特に、結晶構造そのものによる圧力効果など、新しい材料設計、合成プロセスが重要である。

パワーエレクトロニクス材料として注目される α 型酸化ガリウムは、ミスト CVD という低温での材料合成プロセスを用いることによって、きわめて安価に材料を合成し、かつシリコンより高耐圧なスイッチを作ることができる。このような新たな低温合成法によれば、従来不可能と思われていた元素組成での半導体を作製できる可能性があり、飛躍的な特性向上につながる可能性がある。

○システム・制度上の課題

デバイス、材料の研究においては、学際的な人材育成、研究が求められる。たとえば電池は電気化学の専門家が主に関わるが、固体電解質中のイオン移動の理解には固体物理の専門家が必要である。また、熱電変換材料と超伝導材料の間には共通する物理がある。ある大きな課題を設定し、そこに異分野の専門家が広く集うような施策が求められる。また、挑戦的な研究を推進する上で、いかに目標設定をおこなうかという点も課題である。

これらの議論の結果を踏まえ、CRDS は、今後国として重点的に推進すべき研究領域、具体的な研究開発課題を検討していく予定である。

目 次

エグゼクティブサマリー

1. 開会挨拶	曾根 純一 (JST-CRDS) ……………	1
2. ワークショップ趣旨説明	小名木 伸晃 (JST-CRDS) ……………	2
3. ファシリテーター説明	本間 格 (JST-CRDS、東北大学) ……………	3
4. 第一部 電力・エネルギーデバイス・システムの提案 ……………		11
4.1 将来の電力システムと求められるデバイスの姿 ~ CO ₂ フリー・低コスト電力の模索~	田中 謙司 (東京大学) ……………	11
4.2 これからの太陽電池研究開発 超低コスト型・低環境負荷材料の可能性	嘉治 寿彦 (東京農工大学) ……………	18
4.3 人工光合成の挑戦、材料・デバイス・システム化	阿部 竜 (京都大学) ……………	30
4.4 燃料電池 高効率・高耐久性を実現する材料・デバイス開発	八代 圭司 (東北大学) ……………	50
4.5 蓄電デバイス (1) 高入出力・安全な分散型蓄電器を酸化物系・全固体型で目指す	一杉 太郎 (東京工業大学) ……………	58
4.6 蓄電デバイス (2) 大規模蓄電器 レドックスフロー型の革新の方向性	佐藤 縁 (産業技術総合研究所) ……………	68
4.7 高温超伝導材料・デバイス技術の将来シナリオと可能性	水口 佳一 (首都大学東京) ……………	75
4.8 熱電変換 低温域・温度差 100 °C以下での機能実現を目指した研究開発	末國 晃一郎 (九州大学) ……………	81
4.9 パワーエレクトロニクス 低損失・低コスト型新材料の開発方向性	金子 健太郎 (京都大学、(株) FLOSFIA) ……	87
5. 第二部 総合討論 ファシリテーター 本間 格 (JST-CRDS、東北大学) ……………		94
論点 1. 目指すべき将来の電力・エネルギーデバイス・システムの共有 ……………		94
論点 2. 新技術開発・新機能創出の観点から、これからの研究開発課題、 目標と方向性 ……………		97
論点 3. 研究開発制度、産学官連携の構造的課題を乗り越える方策 ……………		98
付 録 ……………		101
付録 1: 開催趣旨・プログラム ……………		101
付録 2: 参加者一覧 ……………		103

1. 開会挨拶

曾根 純一 (JST-CRDS)

本ワークショップでは、エネルギー関係の材料・デバイスを議論する。これまで様々なプロジェクトがあった。エネルギー関係は、声高に必要性が叫ばれ、オバマ政権時代に符合して、多くのプログラムが開始された。いまは、それらが一巡した感がある。

エネルギーというのは人類にとって、喫緊の課題である。そして長期的に取り組まなければいけない課題といえる。また最近では、SDGsの観点からエネルギー課題が語られている。この重要性は人類にとって永遠の課題だ。

今後どのように技術が進展していくのか、どんな新しい領域が拓けていくのか、を議論する。このワークショップが終わった後、その中から、国として、こういう手を打たないといけない、そういう領域を見出していきたい。長丁場のワークショップになるが、是非よろしく願いしたい。

2. ワークショップ趣旨説明

小名木 伸晃 (JST-CRDS)

本ワークショップの趣旨を、図 2-1 に示す。太陽電池、人工光合成や蓄電池など再生可能エネルギーを議論する上で重要なデバイスについて、各先生に発表していただく。その上で、個々のデバイスの性能向上ではなく、共通する材料課題が何であるか、材料開発の共通する方向性を見出すことを目的として議論を行う。

本ワークショップの目的

◎ナノテクノロジー・材料分野がインパクトを及ぼすエネルギー分野、特に創エネルギー、蓄エネルギー、電力変換などに注目し、高性能化や新機軸に関わる材料・デバイス研究開発動向を広く俯瞰することを目的とします。所望の機能を実現させる材料の設計・制御手法や、サイエンスの新局面を拓く方向性、低炭素社会を支える新しい技術の芽などを議論します。

◎第5期科学技術基本計画の先を見据えて、基礎的な科学技術知見の充実や、未来社会へインパクトを及ぼす研究開発の方向性・課題等を、専門家間で議論し発掘したいと考えています。

図 2-1

3. ファシリテーター説明

本問 格 (JST - CRDS、東北大学)

まず、エネルギーの歴史を、この 50 年で振り返る。今回、一番年配の参加者と一番年少の参加者で、半世紀ぐらい年代が違う。本ワークショップは、研究分野としても、化学、物理、デバイス、材料と幅広く横断的な方々が参加している特徴あるものになっている。エネルギー問題は非常に融合的であり、大きく横に広がった学問であり、なおかつ我が国にとって重要な技術である。多くの研究者の方々が、この問題を考えてきた経緯について、最初に説明する。過去どのようなことが行われたか、状況がいかに激変しているか。これを紹介した上で、では未来に何があるか、どうすべきかを議論したい。

60 年前の日本は、石油がほとんどなく、石炭と水力だけという時代だった。そこから一気に 50 年後に、この今の時代になっている。わずか 1 世代で激変している。

その後、1954 年～1973 年、日本は高度成長期に入った。戦前は、石油はアメリカだけだったが戦後、中東の安い石油がたくさん入るようになった。これにより、日本は中東の安い石油の恩恵を受け高度成長が順調に続き、1973 年ぐらいまで成長した。エネルギー消費量も 5 倍以上、上がった。ところが、第四次中東戦争が勃発して石油ショックが起きて、1973 年、成長が止まった。日本の成長は、ほとんどエネルギー消費に比例しているため、オイルショックは大変だった。

その後は、天然ガスが導入され、そして原子力発電も行うことになり、石油の消費はあまり増えていない。昔は石油がなくなると、すべて停まってしまうというという考えがあったが、石油ショックのころから日本は代替エネルギー開発に集中した。今は、あるいは未来は温暖化対策ということで、やはり石油の取り扱いをどうするかという視座から技術開発を行っていくことは間違いない。

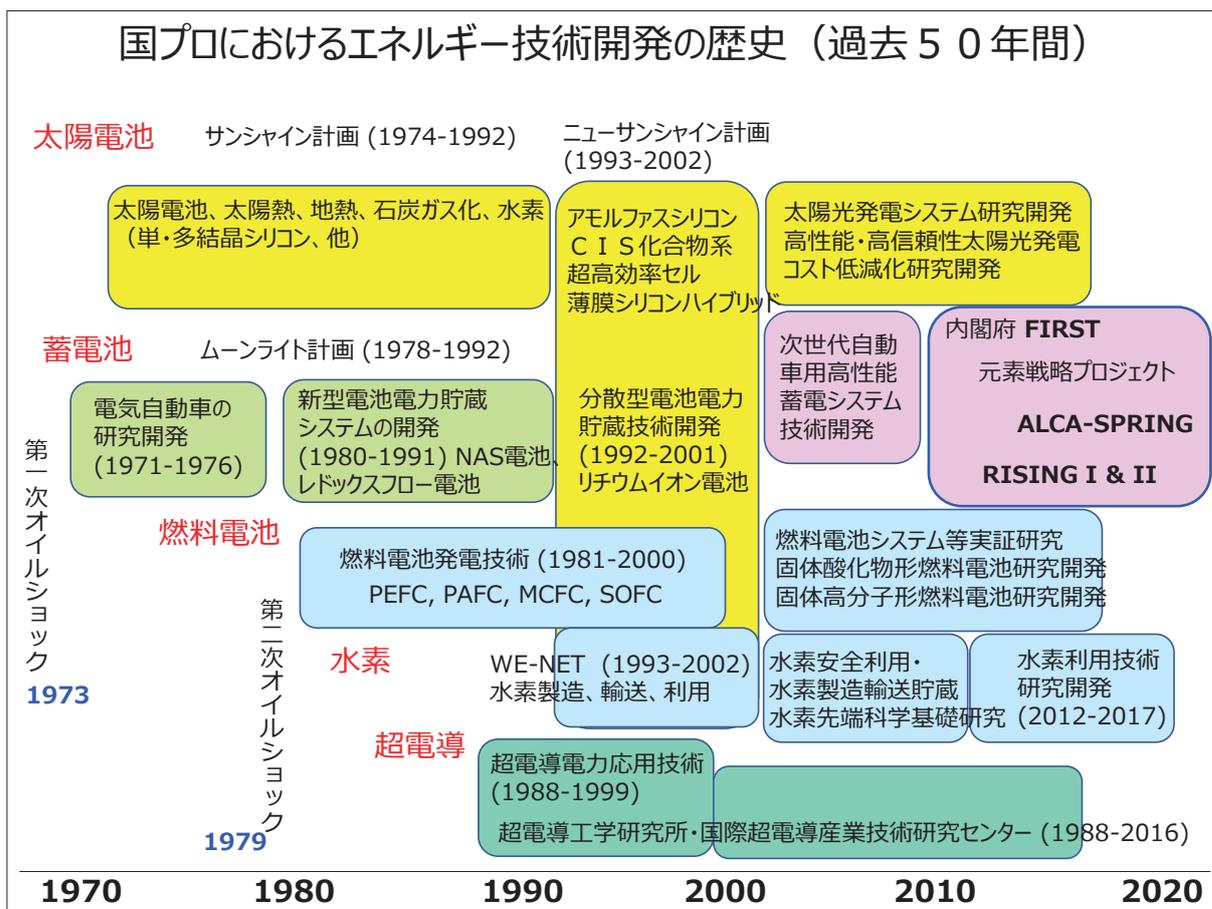


図 3-1

では、オイルショック後に、何を進めたかを図 3-1 で示す。このように、日本では一
通りエネルギー技術の開発を進めてきた。特に、1973 年以降、工業技術院でサンシャイン
計画を開始した。

太陽電池、太陽熱、地熱、石炭ガス化、そして水素など、代替エネルギー開発を国プロ
で行った。その後、第二次オイルショックがあり、蓄電池や燃料電池の開発を開始した。
これはムーンライト計画という。これらの計画を走らせることで、日本のエネルギー技術
開発を促進してきた。

オイルショック前は、日本は太陽電池や燃料電池などは、それほど強い国ではなかつた
が、オイルショックを契機に、デバイス、材料の研究が活発化して世界一になった。サン
シャイン計画からニューサンシャイン計画を推進してきた 1974 年～2002 年ぐらいの間
で、我が国は非常に多額の研究費と多くの人材を注ぎ込んで、図 3-2 に示すように世界
一の技術開発を行った。それが現代も続いていて、日本はエネルギーデバイスと材料は強
いと言われている。



図 3-2

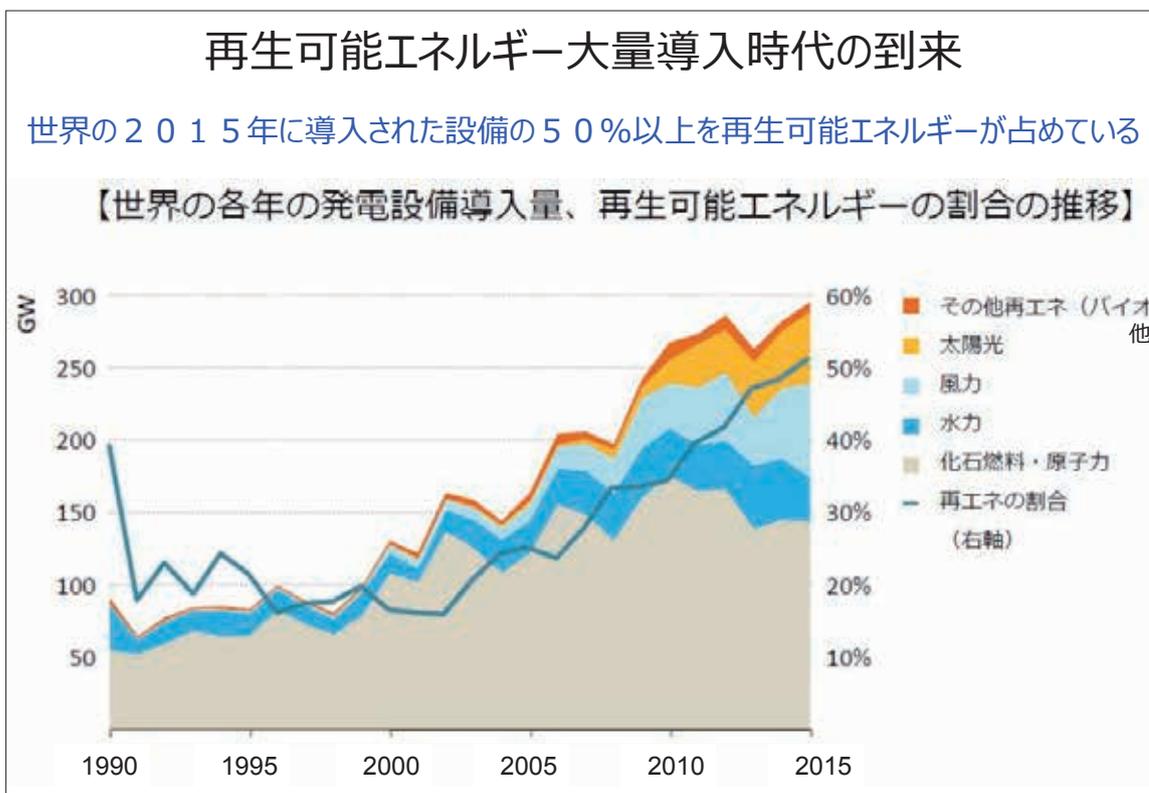


図 3-3

ニューサンシャイン計画が終わった後、石油の値段も多少は落ちついた。ところが、温暖化対策という新たな課題が浮上し、1996年に京都議定書、最近では、COPの21で二酸化炭素を劇的に削減するという事になった。それを受けて、エネルギー技術開発は極めて重要な問題として注目されている。

これまで、国がリードしてエネルギー開発を進めてきた成果をいくつか図3-2に示した。ニューサンシャイン計画の成果として多結晶シリコンやCISの太陽電池がある。3接合の化合物半導体、これについては、シャープがトップデータを出した。

いずれにせよ、このようなデバイスは技術的には世界トップだが、マーケットは他国にとられているという問題がある。ほかの産業機器と同じような運命を今たどっているとの危惧を持つ。したがって、この領域の強化は課題である。

さて、ここまでは過去の話であった。現在はどうなっているか調べた結果を図3-3に示す。私自身、勉強し直して現状に驚いている。

2015年に世界で導入された設備の50%以上が再生可能エネルギーである。2015年を見ると、化石燃料、つまり石油や石炭の発電所ではなく、太陽光や風力の導入量が増えて、実に半分である。30年前からすると、想像できないぐらい、世界的に大量の再生エネルギーが導入されている。特にここ数年で大変多く入っている。

これらを踏まえて、今回のワークショップをこの年、この日にやることには意味があると考えている。どうしてこんなに激変したのか。セルの価格が世界では想定以上に廉価になっている。例えばNEDOのロードマップを見ると、kWhあたり7円にする目標がある。しかし、今、世界の最安値は3円だ。アブダビとドバイではkWhで3円、日本のNEDOの目標は7円だが、既に3円で取引されている。3円となると、すでに基幹電力の電力料金より安いので、太陽電池を入れたほうが得になる。これで、すごい量が今、入り始めている。

図3-4に隔年における太陽電池と風力発電のkWh当たりの価格を示すが、ずっと順調に下がっている。これが世界の平均で、10円である。風力発電も既に10円ぐらいまで安価になっており、基幹電力とほぼ等しいコストである。これぐらいの値段になると、再生可能エネルギーにシフトするというのは当たり前のシナリオであり、このような分野に大きな投資が来ている。

残念ながら日本はまだ少し高い。10円までいってない。多分14円から24円ぐらいだろう。

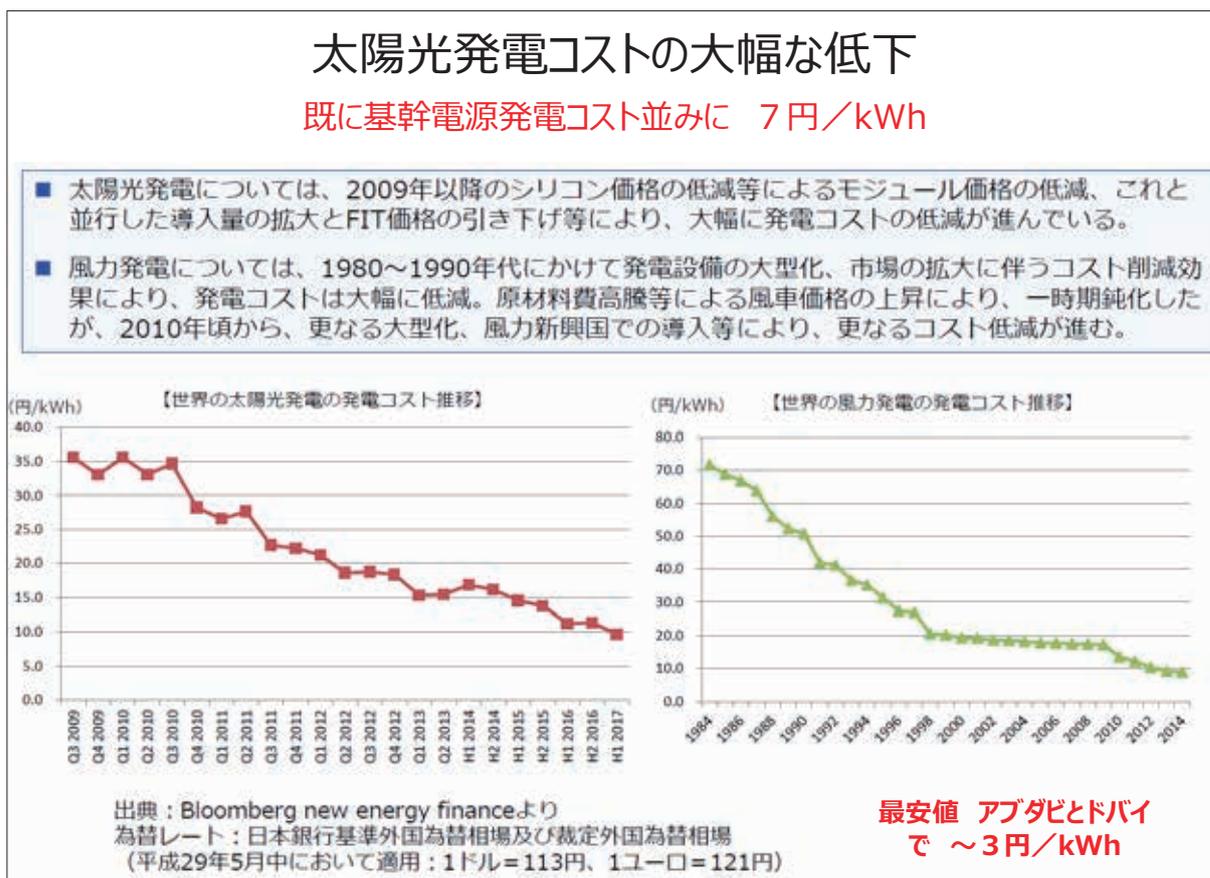


図 3-4

世界の太陽電池累積導入量を図 3-5 に示す。太陽光発電は劇的に成長しており、2016年、昨年度のデータだと 75 GW/ワールドということ、信じがたい値である。1年で 75 GW も太陽電池の設備が入っている。

今の状況は非常に劇的であり、この傾向が続くと、2030年には多分 2 TW 台入るだろうと言われている。世界が太陽電池だらけになる。

図 3-5 に導入量の上位 4 カ国を書いているが、中国が一番大きくて 78 GW、日・独・米が大体 40 GW で同じ程度であり、この 4 カ国が非常に大きく導入している。2016年の 1 年だけでも、中国 34 GW、アメリカ 14 GW、日本 8 GW という、大きな量が入っている。

これだけ入ってくると関連する多くの技術革新が必要になる。大量に発電して、貯めることも重要であり、送る技術も必要である。このあたりに注目しながら、エネルギーデバイス・材料を議論する必要がある。

では日本は国としてどうしているか。日本も当然、世界の状況と密接に絡んでいて、政策的にも新しいことを考えている。まず、日本の二酸化炭素の排出量は 13~15 億 t/y である。これを 2030 年に、2013 年度比で 26 %削減すると政府が発表している。2030 年まで、あと 13 年なので、13 年後に 26 %減らすという中間目標を設定している。

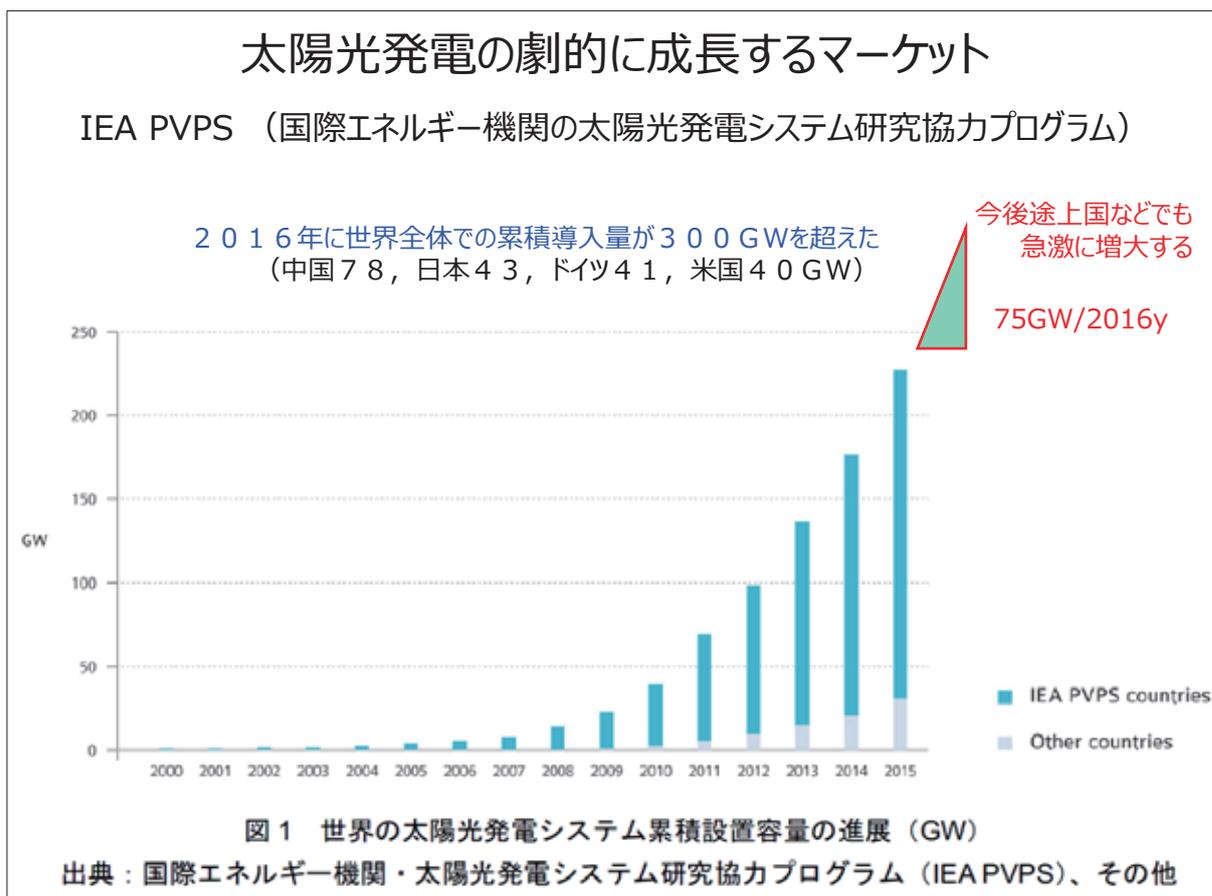


図 3-5

さらに2050年にはCO₂を8割減という、非常に高い目標を設定している。それに向けて、再生可能エネルギーをどう導入していくか。これを、アカデミアのみならず、政府、そして産業界も、大きな関心を持って研究開発の動向を見守っている。

図3-5で示すように2015年、さらにその数年前から、世界では太陽電池や風力発電が大きく導入されている状況にある。その中で日本は今後何をするか。安倍首相は2年前に次のように宣言した。その1；水素エネルギーを促進する。その2；革新的蓄電池を促進する。温暖化対策にも貢献する。それから、日本の産業競争力にも貢献する。そのような観点から、水素と蓄電池と言った。

これは当然であり、二酸化炭素の排出を減らそうとしたら、電力エネルギーを使うか水素エネルギーを使うことになる。これらにより産業競争力が上がればベストである。特に蓄電池。今現在、研究が進められている蓄電池が、温暖化対策にも貢献する、それから産業競争力にも貢献する。これが一番妥当なシナリオと考えられる。

自動車について、詳しく説明する。

昨年の財務省の統計によれば、自動車と産業機械で日本のほとんどの黒字を出している。日本は、自動車による一本足打法と言われるが、一般機械と産業機械も黒字である。電機はほぼ収支0、自動車と、産業機械の黒字で海外から食料と化石燃料を買っている構図だ。昔も今も変わらない日本の産業構造である。鉱物、油、原料を輸入、加工して、ほとんどの日本の黒字がこれらで出ている。

その中でも、自動車の黒字が非常に大きく、10兆円以上である。ところが現在、その自動車が、大変な状況になっている。世界でもっとも自動車のマーケットが拡大しているのは中国であるが、中国はごく最近、NEV法という新しい法律を制定した。2019年にゼロ・エミッション車として電気自動車を10%、強制的に導入する。すなわち、一番伸びている市場で、自動車を電動化するという政策がとられている。他国特にインドも同様である。つまり、ガソリン車には技術が追いつけない国々が、自国の産業を育てるには、ルールを変えないと勝てない。そこで、新規参入が容易な電気自動車へ出資している。

図3-6は、デロイトトーマツの予測である。2050年を見ると、ゼロ・エミッション車かプラグインハイブリッド車かということになっている。

日本の自動車産業は就業人口が534万人もいるので、自動車が全部電動化されると、非常に大きな影響がある。この意味で、蓄電のところが大変重要になっている。

今回のワークショップでは、蓄電に関しては2人の先生が発表する。近未来の蓄電デバイスとして、そして電動車に使える電池ということで、多価イオン電池や全固体電池、そして空気電池など、未来型の電池が国プロで設定されている。蓄電の技術は、他国に負けるわけにはいかない、そのような背景で、アカデミアとそして国研、産官学まで交えて研究開発を進めている。

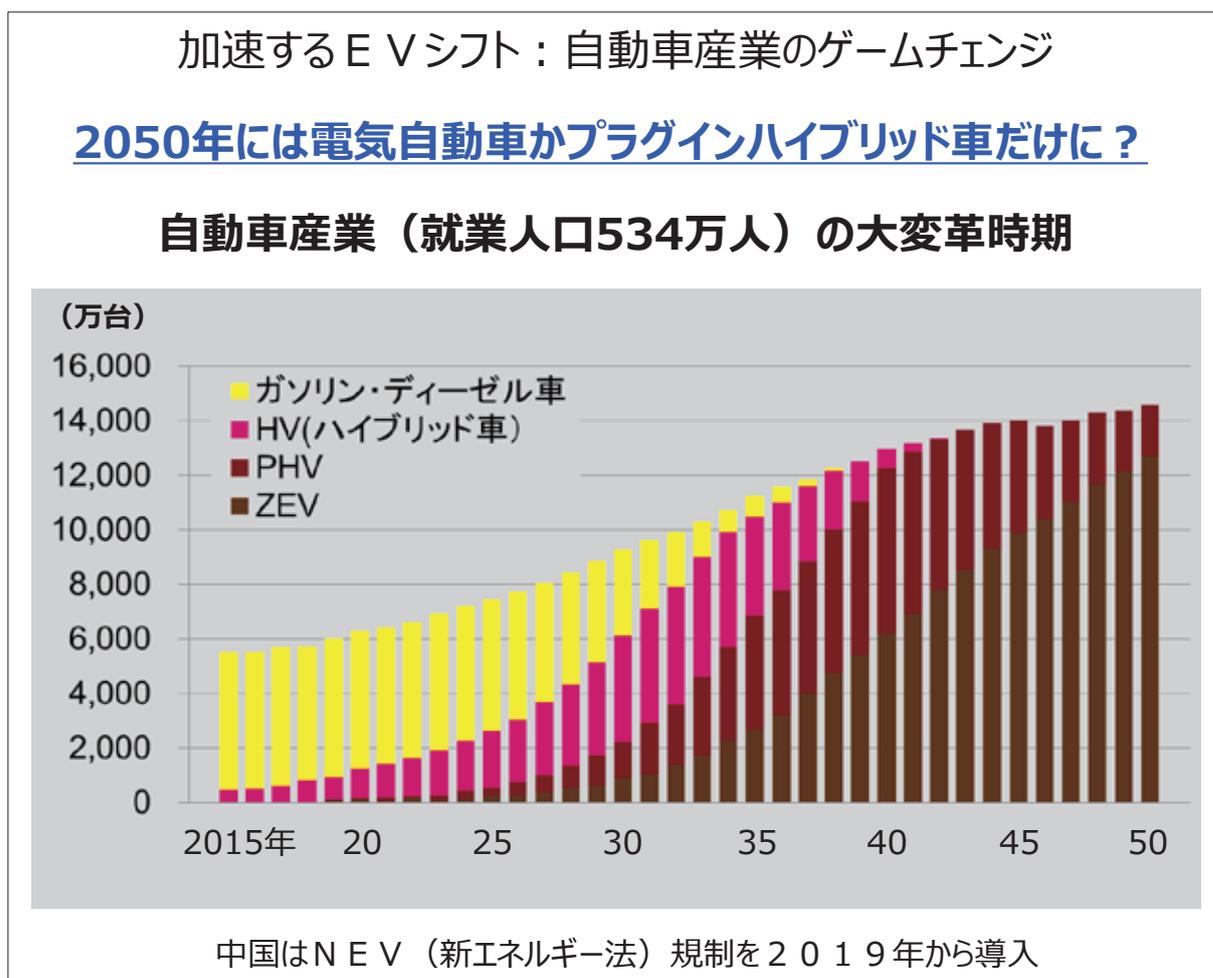


図3-6

また、将来のエネルギーシステムについても発表していただく。太陽電池がテラワットの規模で入ってくる、そして、全部が電気自動車になっている世界が実現したらどうなるか。これを図 3-7 に示す。この資料は JST の低炭素社会戦略センターのシンポジウム資料で、将来の一つのビジョンである。グリッドの中が太陽電池、風力など再エネで基本ができていく。各家庭レベルで見ると蓄電池、そして電気自動車もあり、全部そこで自立分散的なシステムになっている。

エネルギーのマネジメントシステムも重要となる。大きな負荷変動のマネジメントである。太陽電池も風力も非常に出力変動が大きいので、巨大な蓄電設備と、ロスなく送電する技術、パワエレ、それらの制御技術といったシステムが重要になってくる。しかし今のところ、これはなかなか良いものはない。

以上のような背景から、要素技術としての太陽電池、燃料電池、蓄電池、それらの高性能化、低コスト化、量産化の技術開発が重要な課題となっている。加えて、スマート化、つまりそのマネジメントシステムのところも重要であり、これらが今後エネルギー問題、次の世代のクリーンなエネルギー技術を確立する上での根幹的な技術と考えられる。

パワエレ、水素製造、超電導、電力を作り、貯めて、送る基本技術、そしてこれらの制御。過去と現在を知り、将来どのような技術が、あるいはその萌芽的なところとして何があるのかを、本ワークショップでは議論する。

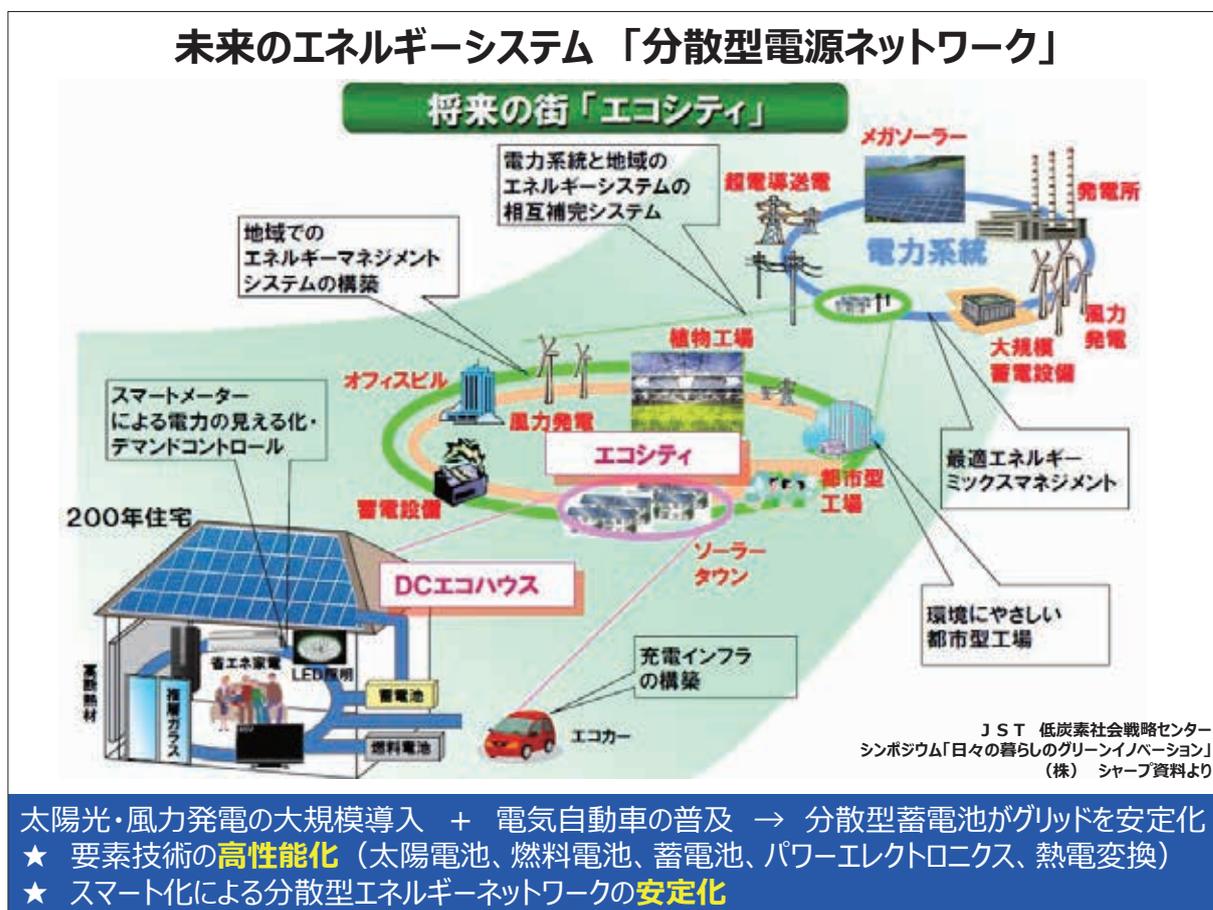


図 3-7

4. 第一部 電力・エネルギーデバイス・システムの提案

4.1 将来の電力システムと求められるデバイスの姿 ～CO₂フリー・低コスト電力の模索～

田中 謙司（東京大学）

限界コストゼロの再生可能エネルギーの破壊力

Consumer and Economic Driven Shift

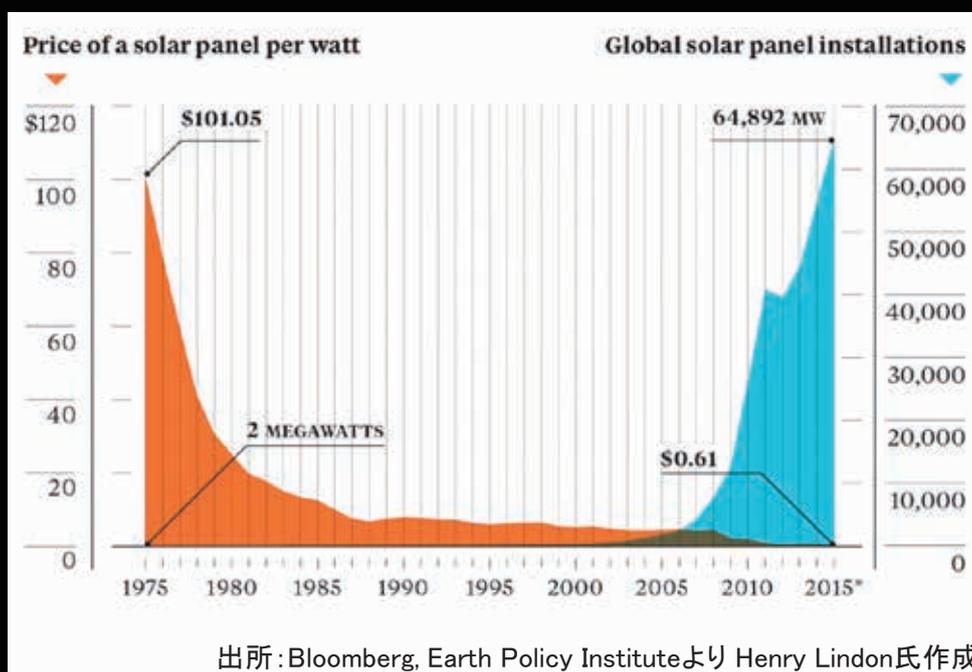


図 4-1-1

自分は船舶工学科で、もともと物流の研究をしていた。その過程で、電力も一つの物流として捉えると面白いと感じ、電力ネットワークの研究を始めた。物流で一番重要なパートは倉庫である。その倉庫にあたる電池に注目して、車載蓄電池の寿命推定法や、それを電力システムに用いる方法、さらに将来の電力ネットワークに使うにはどうしたらいいかということの研究している。ファシリテーター説明のように再生可能エネルギーは、電力システム側が好むと好まざるとにかかわらずどんどん入ってきている。その中で電力システム側がどのようなことを考え、将来的な方向性を模索しているか説明する。

電力システムへの再生可能エネルギーの導入は、補助金なしでも増大するのかとよく問われている。昔は、再生可能エネルギーは高価なものであったが、今は圧倒的に値段が下がっており、グリッドパリティに達している状況にある。グリッドパリティというのは電源の競争力のようなもので、電力ネットワークの中で、その電源がコスト競争力を持つかどうかということを表している。太陽光パネルも、そのほかの新しい新技術についても、風力も含めて十分にグリッドパリティに達してきている状況にある。太陽光パネルの価格

は下落し、一方で導入は指数関数的に増えている（図 4-1-1）。風力に関しても、太陽光に関しても、当初の想定で描いた範囲を超え、さらに加速するようなスピードで導入が進んでいる。もう止められない状況である。

図 4-1-2 は地域別の分散型エネルギー、新エネルギーの導入量。20 世紀のインフラを今まで十分享受できていなかった Non-OECD の国々が投資を始めていることがわかる。右側の棒グラフの水色は風力で、黄色は太陽光。ほとんどの投資が再生可能エネルギーに入ってきている。発展途上国は、有線電話より先に無線電話が導入されていて、無線電話だからこそできるインフラというのが発達している。同様に、発展途上国では再生可能エネルギーだからこそできること、定額制というものが出来ている。再生可能エネルギーは固定費がほとんどで、置いておけば発電する。問題は、いつでも使える電気ではないということだが、使い放題や、ベストエフォート型の電力供給という、先進国では考えられないような電気の形が出現している。

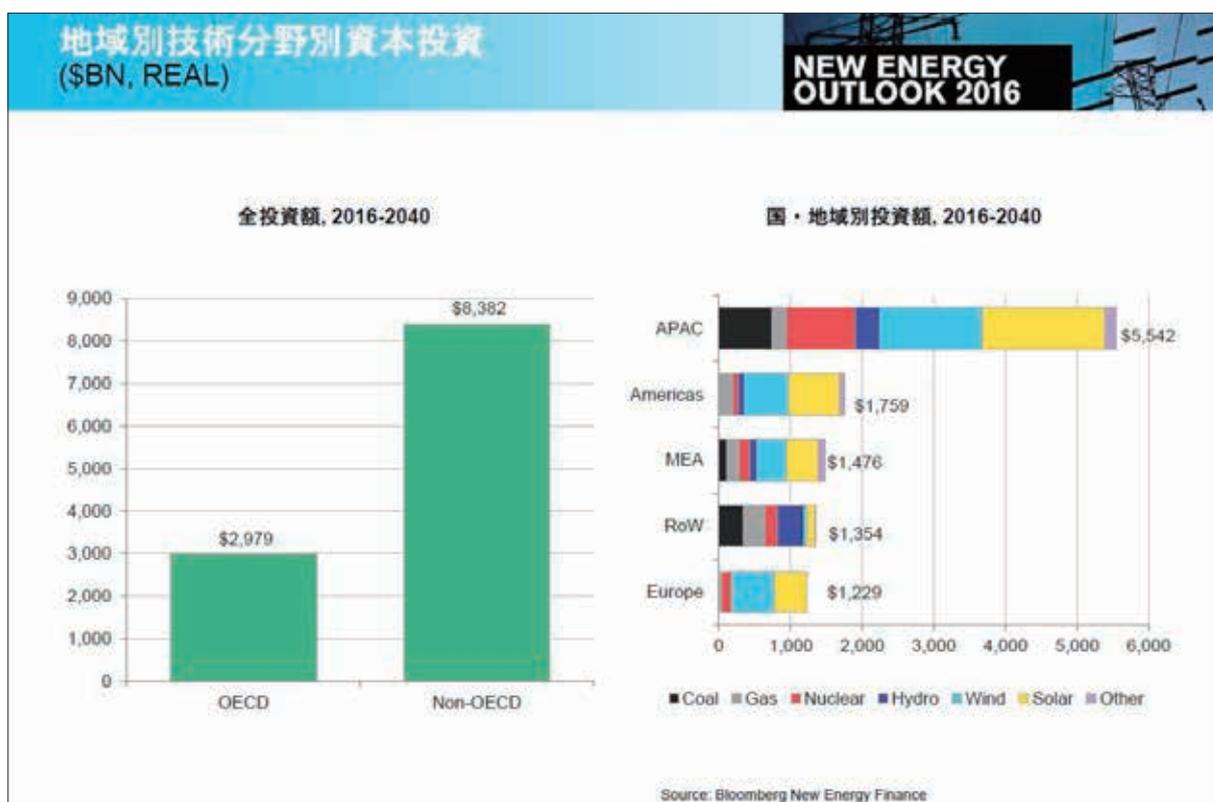


図 4-1-2

例えば、我々の研究室からスピアウトして、アフリカの無電化地域で電力供給の事業をしているメンバーがいる。太陽電池と蓄電池のセットを無電化地域に持っていき、充電した懐中電灯を DVD レンタルのように 1 泊 2 日、30 円で貸し出すというようなビジネスをやっている。社会経済原理上、黒字にならないので、こうした地域では 20 世紀型の電力インフラによる電化ができなかった。しかし、ワイヤレス型、分散型を導入したところ、一気に受け入れられて、開始から 1 年程で 800 カ所、約 24 万人のところへ照明用の電力を供給できるようになった。テクノロジーの進化によって、社会経済原理上これまで無理だったものが、様々な形で実現し始めている。

様々な形のテクノロジーが出てきて、コスト競争力のある再生可能エネルギーが否応なしに電力グリッドに入ってきている状況にあるが、既存の電力会社は安定供給をしなければならないので、再生可能エネルギーを無尽蔵に取り入れることは難しい。積極的に導入している国というのもあるが、日本は島国であるため完全に自立する必要がある、なかなか導入できない状況にある。しかし、それに対して株式市場はかなり明確なメッセージを発しており、新規ビジネスを立ち上げていない電力会社は時価総額が半分以下に下がってしまった。すなわち、マーケットサイドは既存の電力ビジネスに対して、何かしらの新しいこと、変革を強く促している。一方で、電力会社は電力供給という既存のビジネスを提供し続けなければならない、その狭間で苦しんでいる。

では、どこで変革を起こすのか。前提として、今の既存の電力ネットワークの8割方はそのまま残ると考えられる。その上にどんなネットワークが足されていくべきか。将来は分散型発電の導入が否応なしに進んでいくため、電力グリッドは何百万ものユーザーが双方向で接続されるようなネットワークになると考えられる。

将来の電力ネットワークの変化と電力流通の変化

- 分散型発電の導入の進展が進むにつれて、将来の電力グリッドは、何百万ものユーザが双方向で接続されるネットワークとなる

- ソフトウェア定義のネットワーク
- 電力同時同量のIoT分散制御.....

図 4-1-3

図 4-1-3 の左図がニコラ テスラによって基本設計された今の電力グリッド。発電所は集中し、エネルギーの減損が少なく送電されるように最適化されており、かなり効率の良い仕組みになっている。しかし、末端の方で発電して、さらに、それが変動するということを想定した基本設計にはなっていない。これをいかにコントロールして、効率を落とさないで上手く使っていくか。我々は通信になぞらえて電力のインターネット化と言っているが、中央集権型で制御するというのはほぼ不可能であって、それぞれの地域ごとに制

御しながら全体を保っていくネットワークが必要になる。アナログ技術では一つ一つ回路やハードウェアをつくる必要があったが、いろんな使い方に対応できるようなソフトウェア定義のネットワークによって、再生可能エネルギーのような暴れ馬のエネルギーを自動分散的に制御できる技術、IoT 技術、こういったものが導入されれば、どんどん再生可能エネルギーに取り組めるようになる。

こうした期待感の中で、多くの電力会社が様々な試みを開始しようとしている。例えば、IDC のレポートでは、45 %の電力会社がカスタマー・エクスペリエンス・ソリューションに投資するとされている。また、50 %以上の電力会社が新しいテクノロジーと IoT に資本を投入することを考えており、しかし今の人材ではそれを実現できないので、70 %の電力会社が外部から技術や人を取り込んでいくという。すぐに現状の電力ネットワークを入れ替えるという話にはならないが、30 年ぐらい後には、分散型エネルギーを上手く使いこなした者が市場の勝者になっていくだろう。

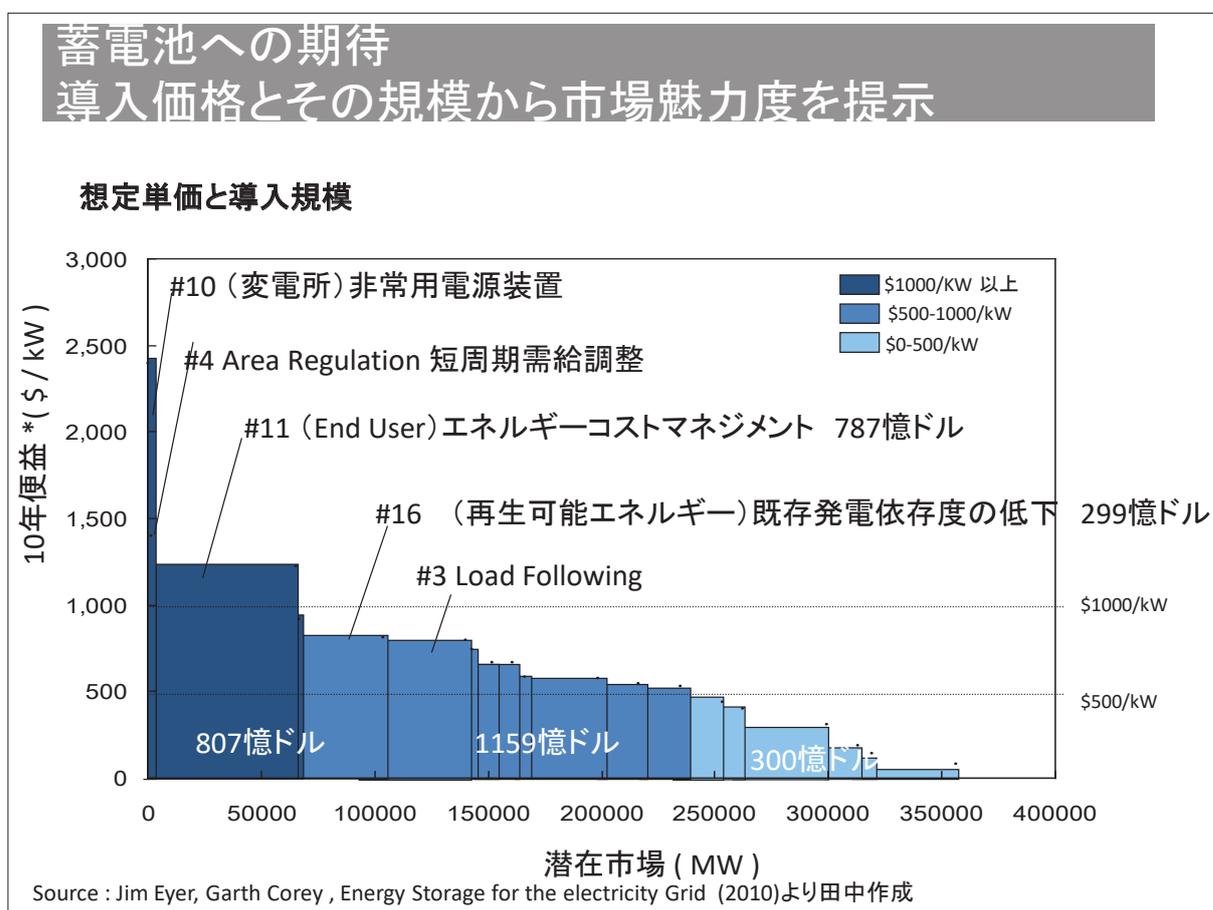


図 4-1-4

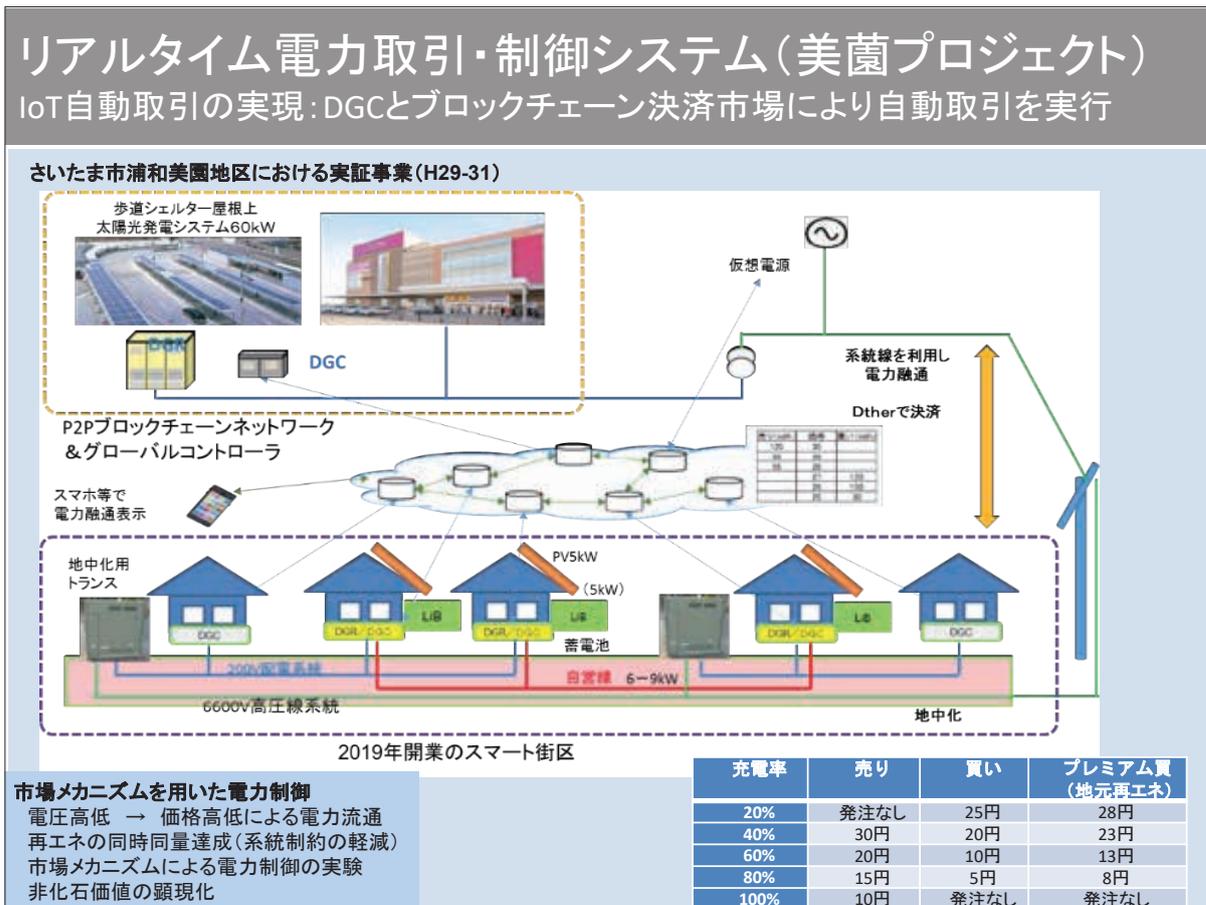


図 4-1-5

注目されている新技術の中でも、新しい電力ネットワークの「米」は蓄エネルギー。分散化の肝は蓄電池であり、キーデバイスとしてのEV電池も無視できない。今はリチウムイオン電池が主流であるが、新型電池への期待も高い。ただし、ユーザー側の電池へのニーズは、安く、長く使えることであって、性能が高ければ良いというものではない。定置用であれば1 kWhあたり200ドル、2万円ぐらいで、15年から20年ぐらい使えば十分という仕様が望まれている。また、電気自動車が入ってくるとの前提で考えると、V to Gを上手く使いこなすような技術や、IoT、さらにはブロックチェーン、クラウドなど、様々なアセットを導入し、それを使いこなす技術が研究され始めている。電池の話については知られていると思うが、1つ強調するならば、寿命の問題。定置用は1回の工事にかかる費用が大きいのので、設置した後、長く使えることが非常に重要になる。ストレージによって再生可能エネルギーを使える形にして欲しいという要求の下、1 kWhあたり500ドル、200ドルを切れば、市場規模が一気に増える(図4-1-4)。1 kWhあたりの金額というのは、10年使う前提で算出しているのだから、20年使える電池であれば半額になる。昔、車載電池の劣化モデルを作ったが、寿命を示せるとビジネスとして使いやすくなるので、このようなモデルはニーズが高い。今、再生可能エネルギーによる電気を、IoT機器を使って完全自動で取引する仕組みというのを作っている(図4-1-5)。この中では電池やセンサーが非常に重要。こうした、人を介さないで分散的に自動制御する仕組みというのが将来は必要になってくる。

まとめ、最近のトピックから

1. 分散型電源の破壊力

[分散型電源の導入は、もう止まらない](#)

日経テクノロジーオンライン-

2016/06/27

BNFFの調査が示すように分散型電源の導入は今後も止まりそうにない

2 新しい電力流通や分散制御が必要

[分散型電力の市場取引、2月から試験実施](#)

NNA.ASIA-2017/11/14

分散型電力の市場取引、2月から試験実施。中国国家発展改革委員会(発改委)と国家エネルギー局は13日、小規模電源から供給される電力について、来年2月から試験的な市場取引を開始。

[三井物産、インドで電気の地産地消](#)

日本経済新聞-2017/08/29

三井物産は消費地の近くに小規模な発電施設を設置する「分散型電源」事業に参入する。インドの電気が通じていない地域や電力供給が安定しない地域に50キロワット程度の小規模な太陽光発電所を設置。

3. 技術によって経済的実現可能へ期待 EV、蓄電池、シェアリング

[シェアリングエコノミー市場、2021年度に1070億円...ライドシェア解禁が...](#)

レスポンス 国内シェアリングエコノミー市場規模は、旅館業法施行令が一部緩和されたことや2017年の「民泊新法」成立を受けて、民泊市場への参入事業者が増加したことなどから前年度比26.6%増の503億4000万円となった

図 4-1-6

【質疑応答】

Q：国の科学技術戦略を考える上で一番伝えたいこと、メインメッセージは何か。

A：日本は電力制御や蓄電池に関して高い技術を持つ希少な国であるが、一方で、新しい試みに関しては、現状のサービスレベルが高いこともあって、受け入れられにくい面がある。ブロックチェーンで電力取引をするプロジェクトが世界には多くあるが、本当に送電できているのは日本だけだ。マッチングをして、IoT 機器とコミュニケーションをさせるようなハードウェア設計も、日本でしかできていない。そういった日本の技術を組み合わせてできたシステムについて、実験ができる場所を国内、あるいは海外で、国が提供できると良い。日本は要素レベルでは世界に勝っているが、システムレベルでも勝っていけるような枠組みが必要。

Q：優れた技術を持っているにもかかわらず日本が負けてしまっていることの例として、ハワイでは蓄電池が求められているが、日本製はオーバースペックで、安くてすぐ使えるものに市場を制覇されてしまっている、という話がある。他にも似たようなことが多く起こっている。寿命や効率が追求されるが、必要なのはその絶対値ではなく、市場が求めているのは効率の値段、寿命の値段といったもの。いわば熱力学、エクセルギー。こうした問題のサイエンスについて、どう思われるか。

A：まだ学問分野として成り立っていない部分があり、こういった全体のシステムを作っても、論文は要素レベルで書かざるを得なかったりする。東大はシステムレベルを学問にできないかという新しい試みを始めており、工学部にシステム創成学科をつくっ

た。日本は要素レベルでは勝ってきたが、システムレベルでいつも負けているので、システムでも勝負したいという思いがある。自分は市場のニーズに対して動くシステムをパッケージでつくって提供するというのを、ひたすら試みているが、それを認めてくれるような側面支援があると、中にいる教員としてはありがたい。

Q : 電力のインターネットに興味があるが、IoT が電力にどうコントリビュートするのか。情報通信はパケットで、1 つの情報を持って、いろんなルートを通す。しかし電力はみんな同じで、垂れ流し。大型の蓄電池のところで電力を出し入れして、IoT、あるいはブロックチェーンでコントロールするとイメージはできるが、通信の世界に与えたようなインパクトが電力の世界で起こり得るのか。

A : 情報通信はアナログのときに比べて市場が 10 倍以上に増えた。同様に電力のインターネットでも市場が増えると考えられる。今、電気は当たり前ながら電圧の高いところから低いところへ流れているが、ブロックチェーンを使うと、電気が価格の高低によって流れるようになる。例えば、地元の再生可能エネルギーだったら 3 円高く買いますという風に、一人一人が投票すると、3 円高く地元の電気が買われていき、そこにお金が落ちるので、地元で太陽光パネルが設置されたりする。また、電力料金のバリエーションも増える。電気自動車を買うとき、プラス 30 万円のオプションを買うと、どこかのクラウド上に自分の太陽光発電所があって、そこで発電した分というのはいつでも買えるとか、そういう形でどんどん電力市場が増える。まさに市場の経済原理に則った商取引が実現できるので、色々なサービスを作ることができる。

4.2 これからの太陽電池研究開発 超低コスト型・低環境負荷材料の可能性

嘉治 寿彦（東京農工大学）

事前アンケートでの今後30年で重要になることに関して、太陽電池における発電の中心は、規模でいうとメガソーラーが中心になる（図4-2-1）こと。メガソーラーであれば、最近、盛んに研究されているのは、シリコンとペロブスカイト太陽電池などを組み合わせた、多接合で高効率の太陽電池で30%以上を目指す太陽電池である。特に今、現実には鉛のペロブスカイトで行われているものを鉛なしにしていこうということも並行して研究されている。しかし高性能な太陽電池は光を全部吸収するため黒色である。また、効率を上げ、かつ低価格化することは非常に重要である。

メガソーラーから離れて、先ほど田中先生の話に出た、IoT、自動車、その辺を考えていくと、身の回りに太陽電池をあふれさせたいと思うものの、そのときに街中を全部黒にしているのかと社会的には考える必要がある。先ほどの話でのグリッドの内部の太陽電池に関しては、黒色ももちろん開発していく必要があるが、効率は色によって差があるが、黒以外にさまざまな色の太陽電池も作っていく必要がある。全体として、無色で赤外と紫外だけ吸収するような太陽電池その他、RGB、反射でCMYK、白、そのような多様な太陽電池である。

概要

事前アンケート②

- 今後30年の将来における重要な研究分野あるいは方向性について、箇条書きでご記入ください。ご発表になる材料・デバイス領域を中心に記載いただければ結構です。（いくつでも）
 - メガソーラー用：シリコンとPbフリーペロブスカイトなどの高効率タンデム型太陽電池（黒色）
 - IoTや自動車用、住宅用、農業用など：黒色はもちろん、様々な色の太陽電池（透過：RGB, 無色 反射：CMYK, 白色+UV, IR）
 - ex. 農業用の緑色吸収太陽電池、ディスプレイのフィルタや発光・表示素子などが太陽電池に
 - 励起子分裂などを利用した量子収率100%以上の太陽電池の実用化

これらの研究分野・方向性に貢献していきたい！ + 発表者の独自の技術の話

図4-2-1

例えば農業用には、葉が吸収しない緑色だけを吸収する太陽電池も研究開発されている。また今後、ディスプレイのフィルター、発光素子、表示素子などが太陽電池も兼ねるようなものも必要になるのではないかと考える。

タンデム以外に、太陽電池1つを使った効率よりも原理的に効率が上がり得る方法を考える。例えば有機太陽電池では、励起子分裂を利用した量子収率が100%を超える太陽電池がある。これが実用化できれば、メガソーラーとグリッド内のどちらに対しても使えるのではないかと考える。

まずこのような将来の方向に向けて、現状どのような研究開発が行われているか簡単に見る。

図4-2-2はアメリカのNRELで日々更新されている各種太陽電池の最高効率を示したもので、小さな1センチ以下の素子のデータなども含まれたものである。この中で低価格や低環境負荷ということで期待されているものは右下のほうに位置する。上のほうにあるのは集光型や多接合のもので、シングルセル、1接合で効率の高いものを見ると、シリコンが青線で見えているもの、緑色はCIGSやカドミウム・テルルなど化合物半導体型のものである。

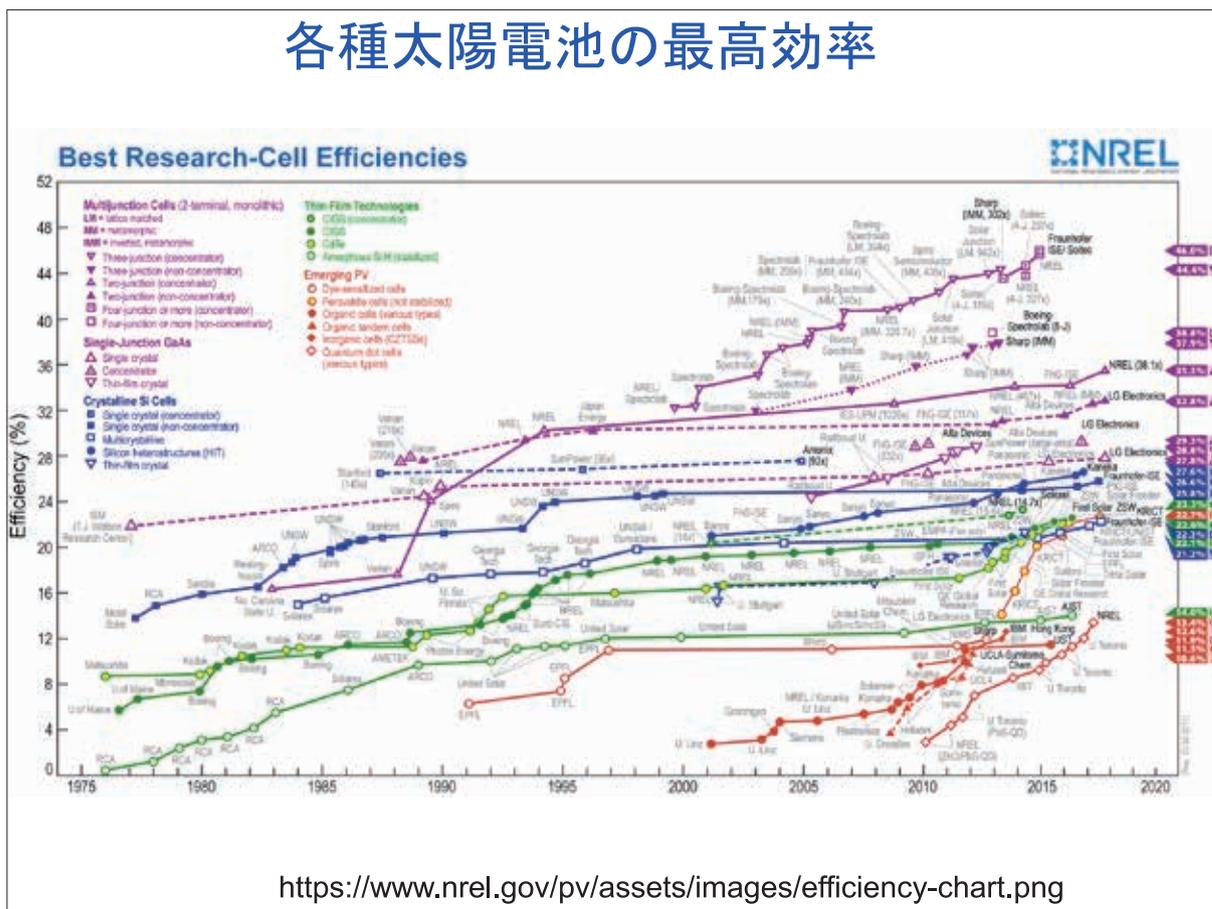


図 4-2-2

それに対して、Emerging PVと書いてあるのが今回の話に相当するものであり(図4-2-3)、白抜きの赤丸が色素増感太陽電池、黄色い丸がペロブスカイト太陽電池、赤丸が有機薄膜太陽電池、四角が量子ドットの太陽電池を示している。それぞれ急激に上がっ

ているが、特にペロブスカイト太陽電池が既に 22 %以上の効率が出るようになっている状況である。

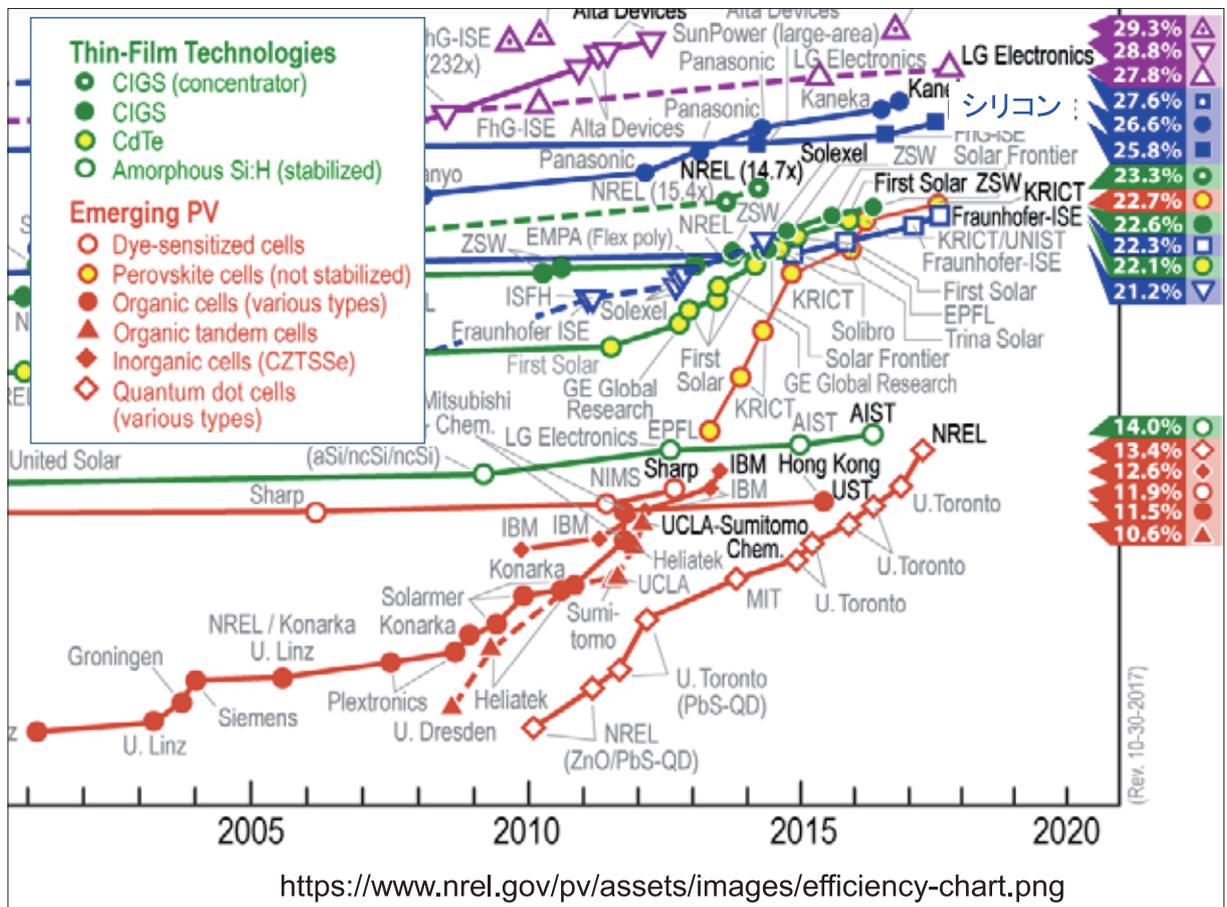


図 4-2-3

色素増感太陽電池、有機薄膜太陽電池、ペロブスカイト太陽電池、これらはどこで光電変換するかが異なる（図 4-2-4）。色素増感は色素で光を吸収して、TiO₂に励起された電子が移動する。有機薄膜太陽電池では 2 種類の有機半導体をそこに使う。ペロブスカイト太陽電池は、メチルアミンと鉛のヨウ素との化合物がペロブスカイト構造という結晶構造をとっているものが光を吸収する。それぞれの材料で光を吸収して、マイナスの電荷の電子とプラスの電荷のホールとを分離して取り出したら電流になるというのはどれも同じである。

色素増感太陽電池は効率の面ではこの 10 年ほど徐々に伸びつつも 10 %前後が多いが、周辺技術は非常に発展し、既にモジュールがサンプル出荷されて、ネット通販で高価ではあるが一応誰でも買えるところまで来ている。

量子ドット太陽電池はまだ研究開発段階だが、東大の久保貴哉先生の研究例では（図 4-2-5）、同じ材料でもドットの大きさを変えることで吸収波長をこれだけ変えられ、ピーク波長で 1,500 nm 位まで吸収端をいろいろ変えられており、他にも中間準位の利用などの研究開発も進んでいる。

有機系太陽電池の違いーどこで光電変換するか

色素増感太陽電池:

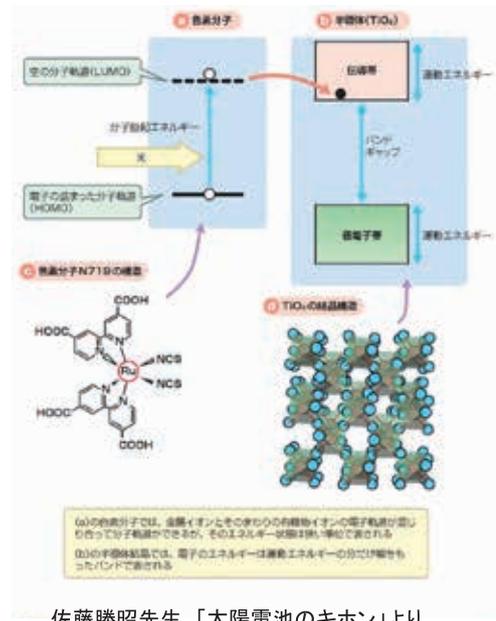
TiO₂上に単分子層吸着した色素が光を吸収し、励起された電子がTiO₂に移動

有機薄膜太陽電池:

2種類の有機半導体が光を吸収し、その界面で励起子が電荷分離

ペロブスカイト太陽電池:

有機ペロブスカイト (CH₃NH₃PbI₃など) が光を吸収し、電荷分離



光を吸収して、電子(-)とホール(+)を分離できると電流が得られるのはどれも同じ

図 4-2-4

量子ドット太陽電池

様々な波長域の量子ドット太陽電池の発展

同じ材料でもドットの大きさでバンドギャップと吸収端が変化

PbS 量子ドット/ZnO ナノワイヤ太陽電池の短波長赤外域での光電変換特性
 Short-wavelength infrared PbS QD/ZnO NW-based solar cells
 東大先端研¹, 東大院総合文化² 王 梅¹, 久保 貴哉¹, 中崎 誠太郎¹, 瀬川 浩司^{1,2}
 RCAST UTokyo¹, Dept. of Gen. Sys. Sci.², Haibin Wang¹, Takaya Kubo¹,
 Jotaro Nakazaki¹, and Hiroshi Segawa^{1,2}
 E-mail: ukubo@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp

本年3月の応用物理学会
 東大、久保先生のご発表要旨より

その他に、中間準位の利用などの新原理の研究開発もいくつかの機関で進められている。

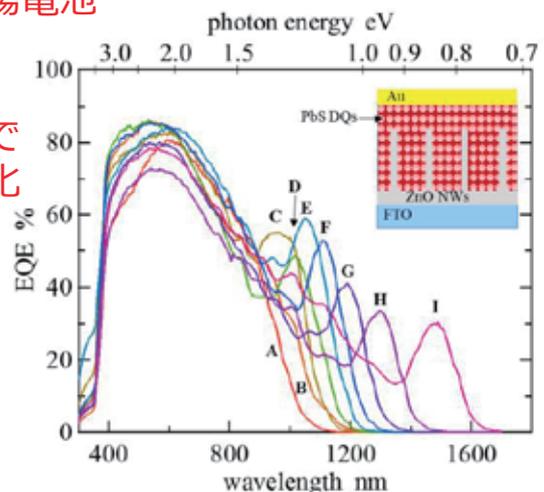


Fig. 1. EQE spectra of the PbS QD/ZnO NW solar cells with the different Colloid QDs and a typical solar cell structure (the inset figure).

図 4-2-5

ペロブスカイト太陽電池は桐蔭横浜大学の宮坂力教授の研究室で 2000 年代に最初に報告された。その後、急激に効率が伸びて今年 7 月韓国のグループからは 22.1 % という報告がされている。

シリコンとのタンデムにおいては、30 % 以上が目指されているが、現状はシリコンとペロブスカイトを組み合わせるとシリコンだけよりも効率が良くなるという報告がベルギーの IMEC から最近された段階である。

興味深いものとして、図 4-2-6 はアメリカ NREL から先月報告されたものである。窓材として、黒色と無色が温度によって切り替えられ、かつ太陽電池として使えるという材料である。これは窓用だが、ディスプレイや電子ペーパーも、太陽電池にできるとおもしろい。

色を変えられる太陽電池

これは窓用だが、将来、 ディスプレイや 電子ペーパーも 太陽電池に？

NREL Develops Switchable Solar Window

November 27, 2017

Demonstration device dynamically responds to sunlight by transforming from transparent to tinted while converting sunlight into electricity

(ペロブスカイト太陽電池)

NATURE COMMUNICATIONS | DOI: 10.1038/s41467-017-01842-4



Lance Wheeler (front) developed a switchable photovoltaic window along with (from left) Nathan Neale, Robert Tenenl, Jeffrey Blackburn, Lisa Miller, and David Moore. (Photo by Dennis Schroeder/NREL)

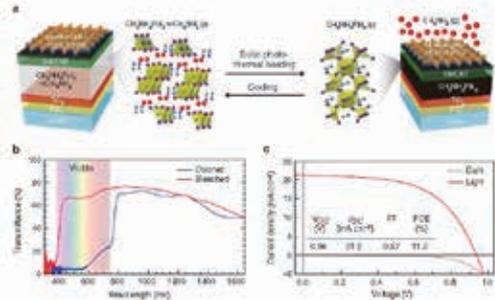


図 4-2-6

低環境負荷の面では、今のペロブスカイトで非常に問題になるのは鉛を使っているということである。もちろん管理すれば問題ないが、メガソーラーはともかく、街中でこれを使うわけにはいかないだろう。図 4-2-7 のペロブスカイト構造ではこの白丸が 2 価の金属イオンを使っているが、鉛を用いると性能が良い。これをより安全な元素で代替したいのだが、鉛フリーにすると効率が悪い。一方で鉛と MAI、FAI の系では良い効率が出るので、研究が発展しやすく、主な研究開発が鉛の系に集中しがちである。

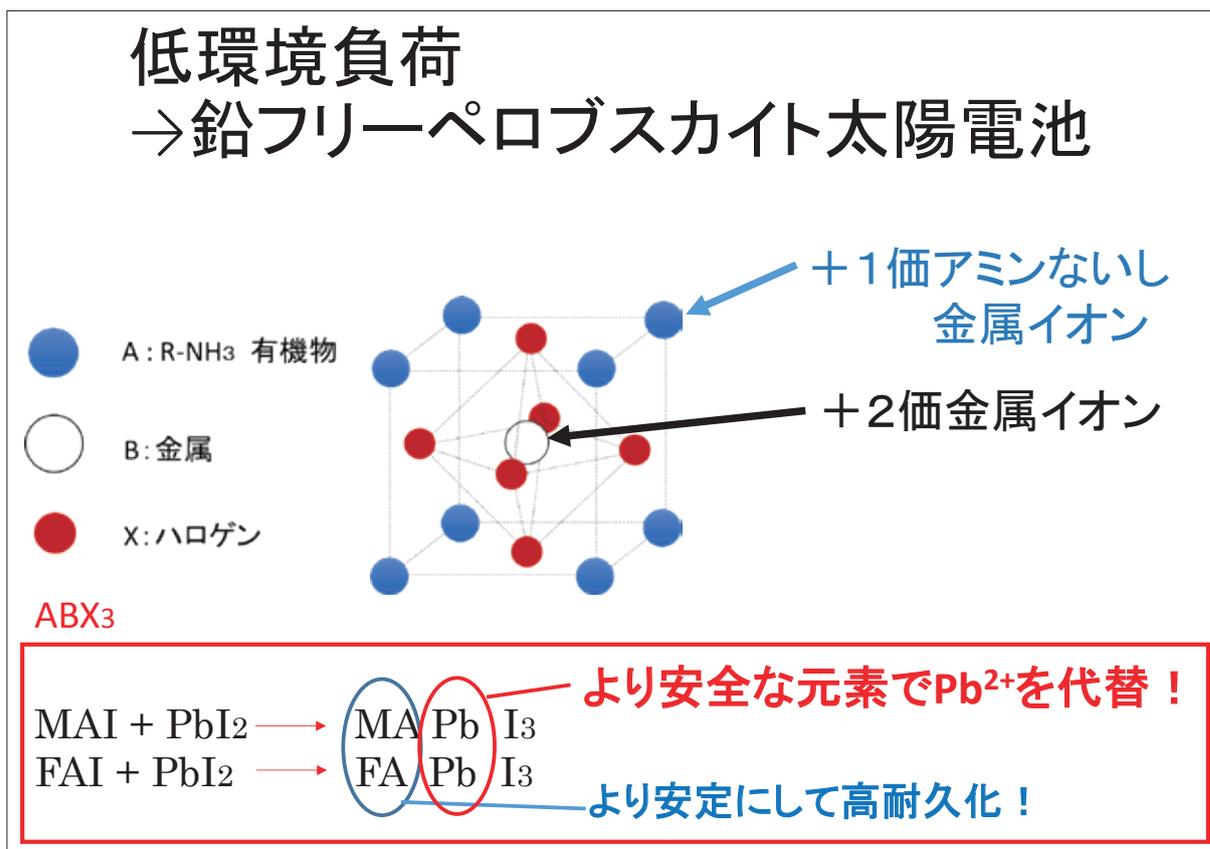


図 4-2-7

もちろん鉛代替の研究は世界各国、日本を含めて行われているが、難しいのは材料系が限られることである。価格や毒性が非常に高いものを除いた場合に、一番有力なのがスズとビスマスである。いずれ鉛に匹敵する性能が出ると考えるが、スズに関しては、空気中ですぐに酸化して白くなる安定性の問題がある。ビスマスに関しては非常に安価であるが、主に鉛の副産物として産出されるレアメタルであり、鉛の代替としては問題になる恐れがある。その点を除けば安価、無害で非常に良い。

それ以外の系も検討していくべきであるが、ペロブスカイト構造をとるための幾何学的な制約があるという点が難しい。図 4-2-8 は鉛の価格を 1 として、様々な元素のイオン半径をプロットしたものである。鉛に近いものが同じような太陽電池をつくりやすい材料であるが、その中で価格が安いものは、やはりスズ、ビスマスである。それ以外では、水銀は使いたくない。カルシウムは使えたら良いが、動いたという報告は今のところない。スズとビスマスが有力である

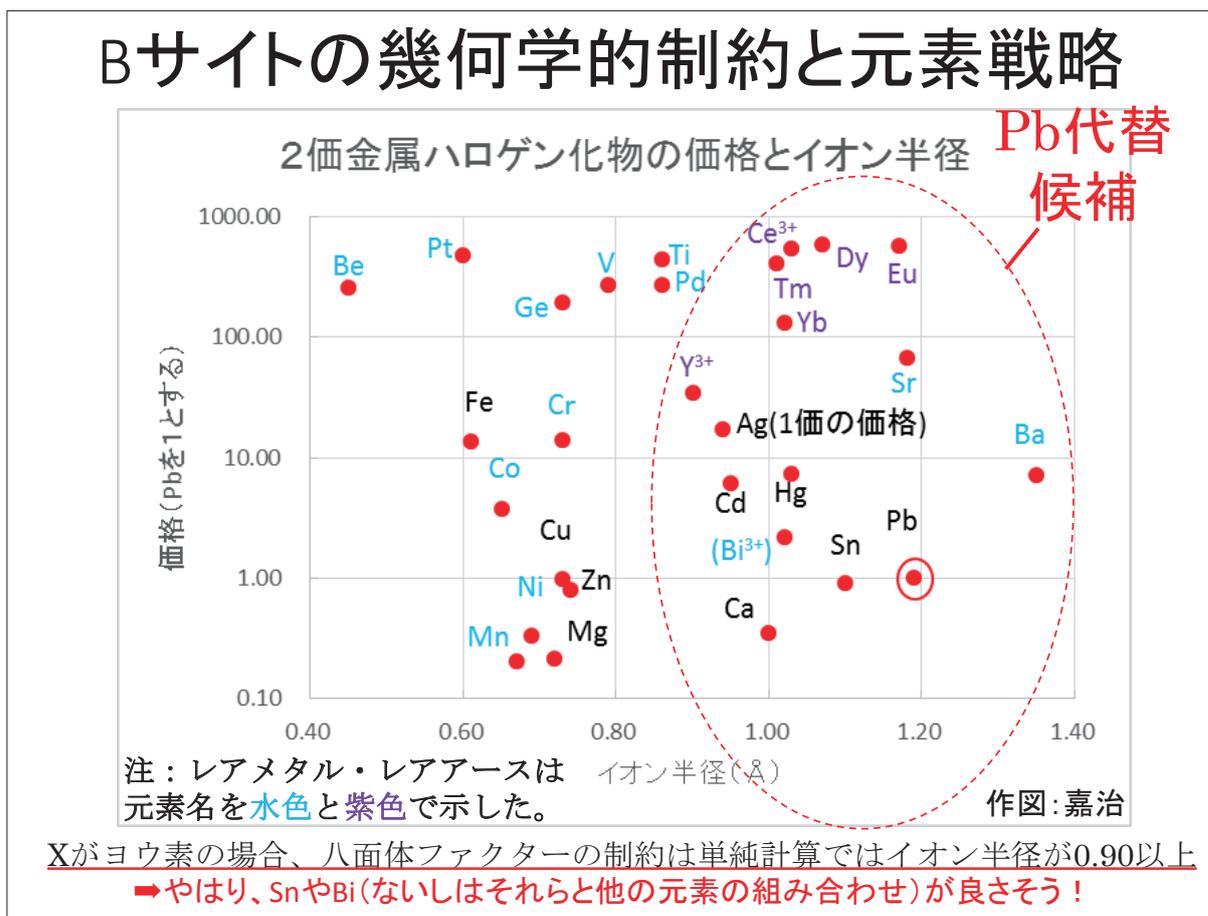


図 4-2-8

しかし、これは統計的なものなので、統計を離れた例外というのはかなりある。例えば、計算結果からは普通やらないものを私のところで試したところ、効率は低いですが太陽電池として動作した（図 4-2-9）。これは有機物のほうを普通やらない組み合わせに変えたという例である。なぜ普通やらないかという、鉛とこの有機物ではペロブスカイト構造を作らないことが知られており、スズとこの有機物では計算上はさらに不利になる。しかし、試してみたらペロブスカイト構造になり、太陽電池として動作したものである。このように統計から単純に予測されるところから離れたもので、ほかの金属も見つかるかもしれない。

有機薄膜太陽電池、有機半導体エレクトロニクス分野で最近一番話題になっているのは、iPhoneX に有機 EL が載ったということ。概して言うと有機薄膜に電力を与えて光らせるのが有機 EL で、光を当てて電力を取り出すのが有機薄膜太陽電池である。有機 EL とその製造設備の普及が進めば、同じ材料系の有機薄膜太陽電池の製造コストも下がる。顔料や染料を使うため、環境負荷の面でも良いと考えている。

有機薄膜太陽電池では三菱化学が昨年、実証実験してサンプル出荷もしており、窓に太陽電池を貼っている。諏訪東京理科大の渡邊康之教授は、ビニールハウスに有機薄膜太陽電池を貼り、その中で植物を育てる実証実験を進めている。

でも、計算結果から、通常は試さない 例外の組み合わせでできることもある。

**AサイトにMA、FAを一切使用せず、MA、FAより
イオン半径の大きい熱安定な有機分子を導入した
三次元鉛フリーペロブスカイト太陽電池が実際に動作**

(発表者ら、今年7月報告 金属ではなく、アミンを変えた例)

1. イオン半径が大きすぎてヨウ化鉛とは反応しないとされる
グアニジンヨウ化水素酸塩が常識に反し、ヨウ化スズとは反応
2. グアニジンヨウ化水素酸塩は、MAI, FAIと異なり、
熱分解の問題なしに真空蒸着
できるほど熱安定



$PbI_2 + GI$
(反応せず、元の
ヨウ化鉛の色のまま)



$SnI_2 + GI$
(反応し、より広範囲
の波長の光を吸収)

発表者も、金属含め、他の組み合わせも探索中

H. Ishibashi, M. Katayama, S. Tanaka, T. Kaji,
Scientific Reports, 7, 4969–1–6 (2017).

図 4-2-9

海外の例では、ドイツの産官学連携でつくられたベンチャー企業の Heliatek が、ビルの窓や屋根、遊歩道の屋根に太陽電池を設置している。現在、シンガポールのファンディングを得て、そちらで大規模に実証実験している。この例では材料系としてはフラーレンが使われているが、最近色々な材料が出てきており、特に中国から数多く出ている。

これらの材料系で無機系にない特徴としては、一部の特定波長を透過できるということが興味深い特徴である。また一つの光子を受けて、電子が2つに分裂して電流が倍になる励起子分裂という現象が原理的には報告されている材料もある。

低分子の有機半導体の真空蒸着法は有機 EL の生産の主流であるが、太陽電池では高分子に比べて遅れが目立っている。私が見出した技術である共蒸発分子誘起結晶化法を図 4-2-10~12 に示した。この手法は、普通の蒸着に対して、真空中に液体を一緒に飛ばすというだけである。それだけのことであるが、精密制御して太陽電池をつくると、従来の方法では 40 nm から厚くすると電流が落ちるのに対して、この方法では吸収が飽和するまで電流が上がっていく。通常と二桁以上違う 10 μm の厚さまで正常動作する。また無機材料でも、ペロブスカイト太陽電池の系で試すと、結晶の大きさが制御できている。特徴としては、結晶化して、結晶のピークが出てくる、断面の構造が変えられる、また自由に結晶の大きさを変えられる点である。

有機薄膜太陽電池のような研究開発中のデバイスの性能を将来予測する場合に、普通、その時点での材料のパラメーター、例えば厚さ 40 nm を前提とした予測が立てられている。しかし、ここで言いたいことは、それは予測の時点での一般的な使い方が悪く材料の

潜在能力を生かし切れていないことがある。使いこなせば $10\ \mu\text{m}$ でも全く同じ材料で動くことがわかる。つまり研究開発が発展したときのパラメーターの推測も含めてデバイス性能の将来予測をすることが大切である。これで将来、より良い予測を立てられるようになるというメッセージである。そのために、あえてこのような普通やらない分厚いものをつくっている。

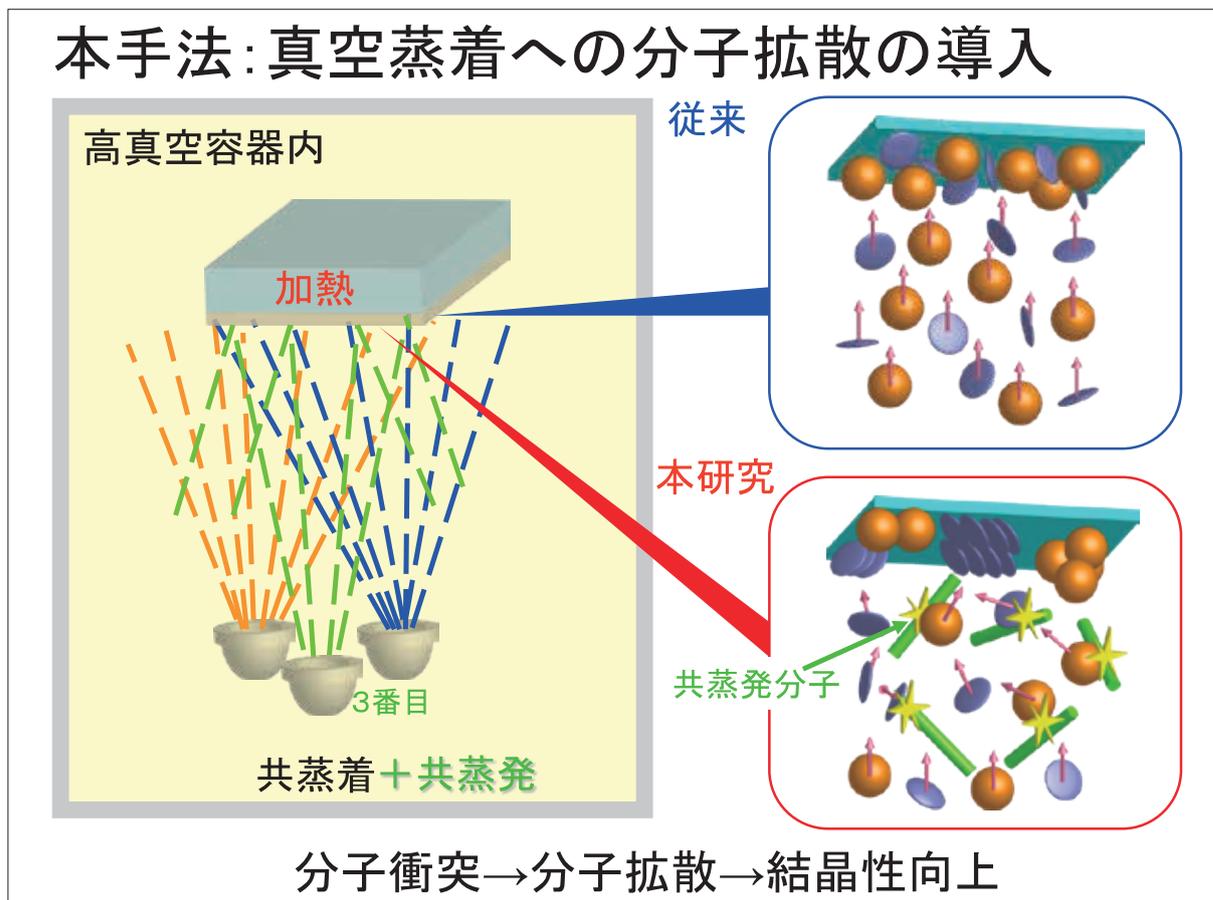


図 4-2-10

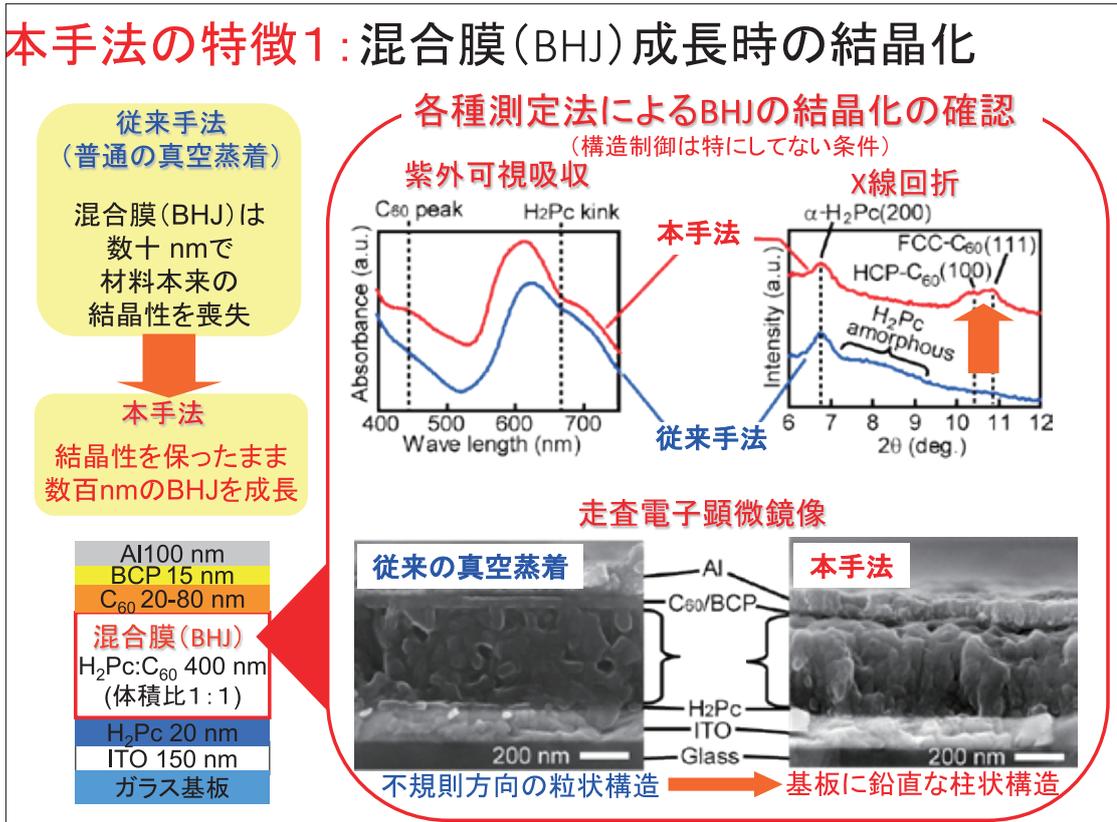


図 4-2-11

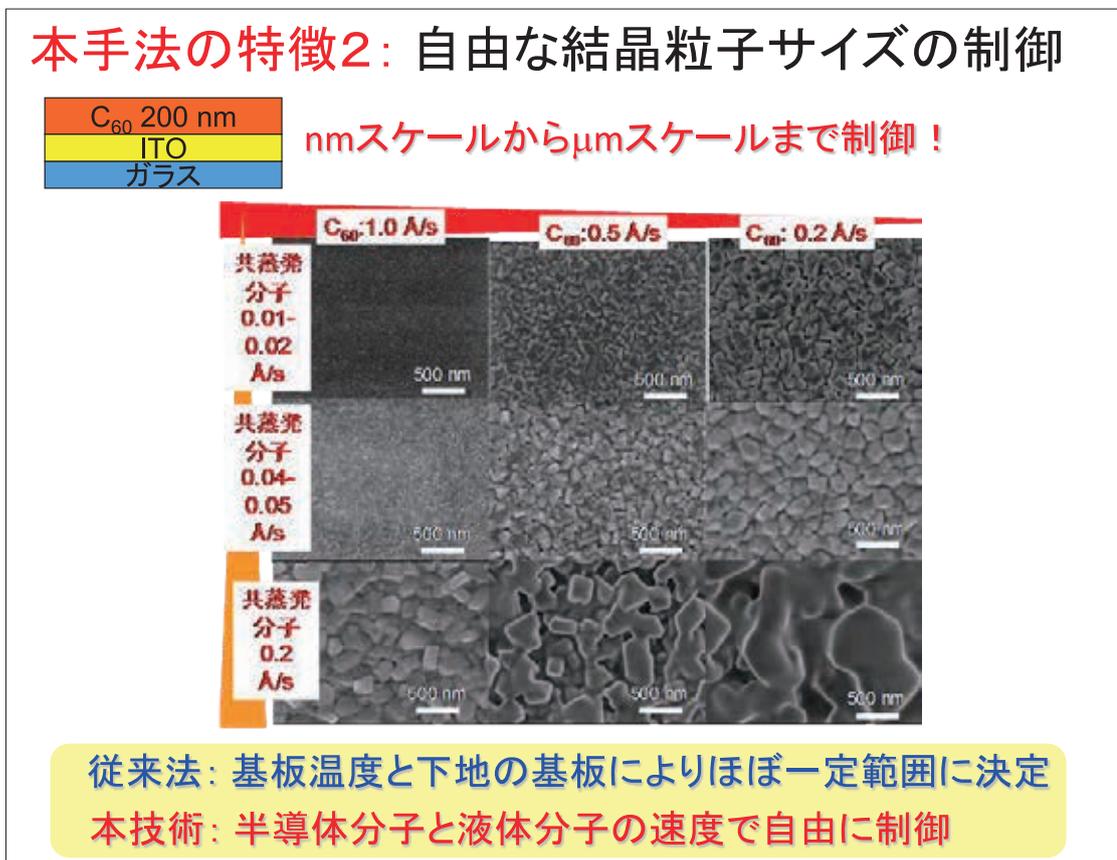


図 4-2-12

【質疑応答】

- Q：太陽電池に使われている材料系が広がってきて、着目すべきような新しい材料で急激に効率が上がってきている。また鉛フリーのペロブスカイトでは統計的にはできないと思ったものが実はできたという話があった。元素戦略的な動きでマテリアルズ・インフォマティクスが世界中で行われているが、そのような計算的な手法を使って太陽電池の元素の構成の斬新なものを見つけるような研究は行われているか。
- A：行われている。スーパーコンピュータの京を使って行われているものが、最近、理研から報告がある。出てきた結果を見ると、自分で周期表を眺めて考えた結果からそんなに遠くない。恐らくそれは、スーパーコンピュータを使っているからといっても、ある程度、限定して初期条件を入れないとできないからではないか。
- C：支配因子をどの辺に持っていくかというところで、人間が関与すると当然の結果になってきてしまう。今後そのような手法は幅広く発展しているので活用されると良いのではないか。
- Q：メガソーラーが中東などでも普及し始めているが、実際やり始めたら砂がついて発電効率が下がって、作業員が貴重な水を使って洗っている、というようなことが現実的にクローズアップされている。そういう意味で太陽電池の効率向上だけではなく、実際のオペレーションにおいて発生している課題に対する研究アプローチはなされているか。汚れ防止や、20年間発電効率を維持できるような実装技術はどうか。
- A：大学での研究というよりは、恐らく企業のほうでされているのではないか。先日、太陽電池の国際学会に出た折り、隣に座った外国人がアラブ諸国でメガソーラーの納入をしている人だったのでそのあたり聞いてみた。「そういう問題は現状では起こっているが、全体で見るとそれほど大きな率ではなく大きな問題は生じていない。しかし、10年後、20年後にどうなっているかは誰も知らない。」というように言っていた。
- C：良い太陽電池ができて、実際に普及するかどうかは、寿命や耐久性を含めたところもあり、企業側も当然やっちはいるが、うまく解決できない。総合的に太陽電池パネルとしての性能を維持するという観点も大事。
- Q：鉛レスと言っているが、緻密なサイエンスをしているときに、急に文学とか宗教が入ってきたように聞こえる。鉛レスと言っても、鉛蓄電池は世の中に出回っている。どこまで、どうやって使えば鉛が害になるかについて、どう考えているか。
- A：私自身のことに限定してお答えすると、3年前に研究室を持ったときに、もうすこし幅を広げるためにペロブスカイト太陽電池もやり始めたが、鉛は後追いで手を出せないぐらいもう十分発展しており、鉛フリーを研究したほうが新しいことが出せると考えてやっている。
- C：鉛フリーとか有機、単独で今やっているが、シリコンと組ませてトップセルに使うように転用するような話になってくると、エンジニアリングとサイエンスと両方発展してきた非常に良いのではないか。
- Q：鉛フリーはEUのRoHS指令に起因していて、先ほどの質問の鉛蓄電池のように回収可能であれば問題ないが、その観点では鉛ペロブスカイト太陽電池をどう考えるか？
- A：メガソーラーは法的に管理されているはずなので鉛蓄電池と同様の回収は可能と考える。一方で、グリッド内、街中での利用やIoT用を想定した場合は無理と考える。

軽量・フレキシブルも特徴の一つとして開発されているし、例えば先ほどの窓材の例など回収できると思えない。

Q：有機薄膜太陽電池を桁違いに厚膜化できた肝は何か？具体的な物理パラメーターは何が違うのか？

A：精密制御しながら、とことん結晶化を進めたということ。また、結晶化を進めた際に起きる弊害を取り除く工夫も必要である。物理パラメーターに関しては、混合膜にも関わらず移動度が単結晶に匹敵するという結果が、海外の研究者との共同研究によりプレリミナリーには得られている。

4.3 人工光合成の挑戦、材料・デバイス・システム化

阿部 竜 (京都大学)

人工光合成は、そろそろ基礎研究だけではなくて、本当に実用化を考えたところにシフトすべきという状況にある。

人工光合成の研究は、最近では、水を分解して水素もしくは過酸化水素をつくるというもの、二酸化炭素を還元して再資源化する、この2つが主 (図 4-3-1)。共通しているのは、水を電子源にしないと実用化は無理という点で、水からいかに電子をとるかがボトルネックになっている。

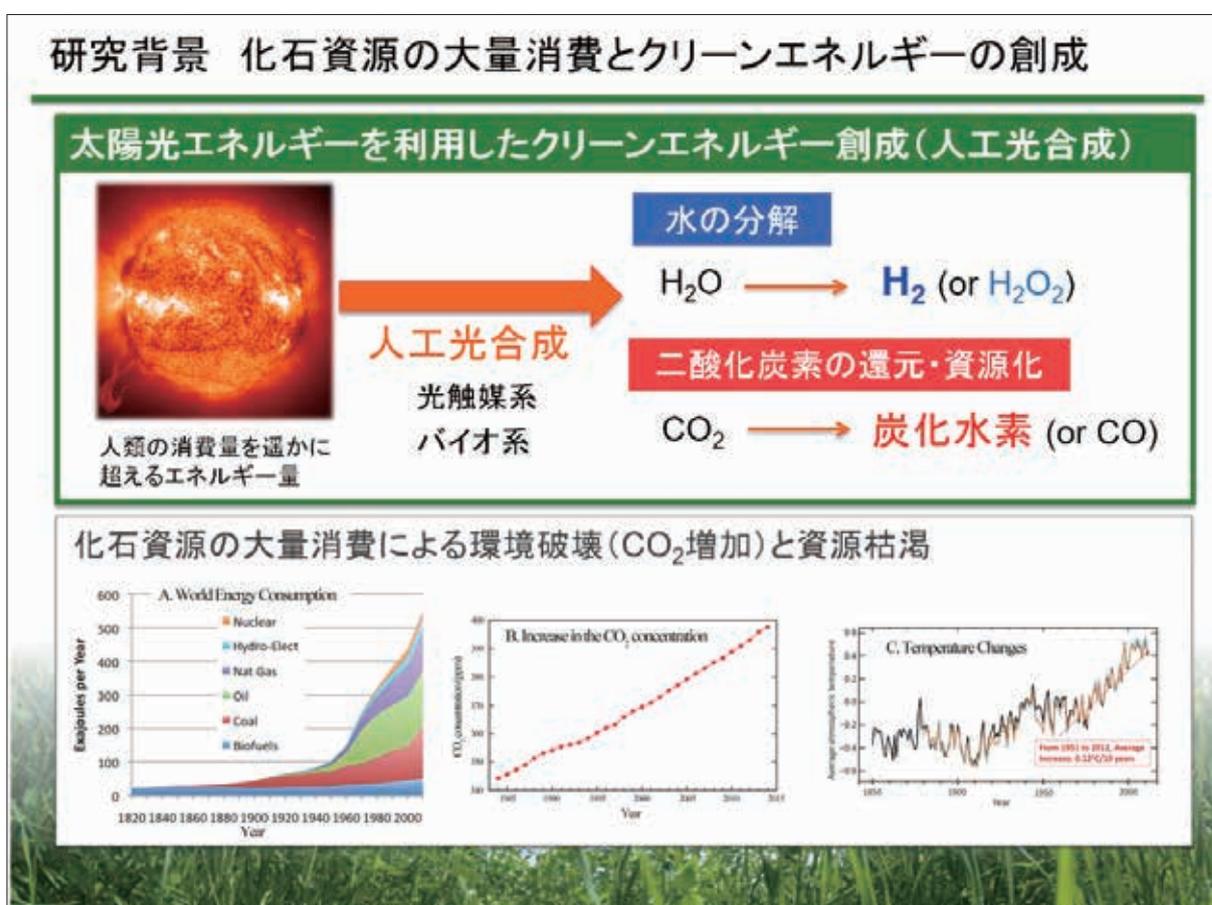


図 4-3-1

歴史を振り返ると、本多・藤嶋効果という酸化チタンを使ったものが 1969 年、1972 年に「nature」に出て一世を風靡し、そこから 10 年ぐらい非常に世界的に人工光合成の研究がはやったが、非常に難易度が高く、特に可視光を使った水分解は 30 年以上実証されず、世界的には下火になり、ほとんど日本しかやっていない時期があった (図 4-3-2)。しかし、日本で研究が継続的に行われたので現在に至っているという状況である。光触媒というと、環境浄化のほうにいったのは、やはりこの難易度が高いためである。

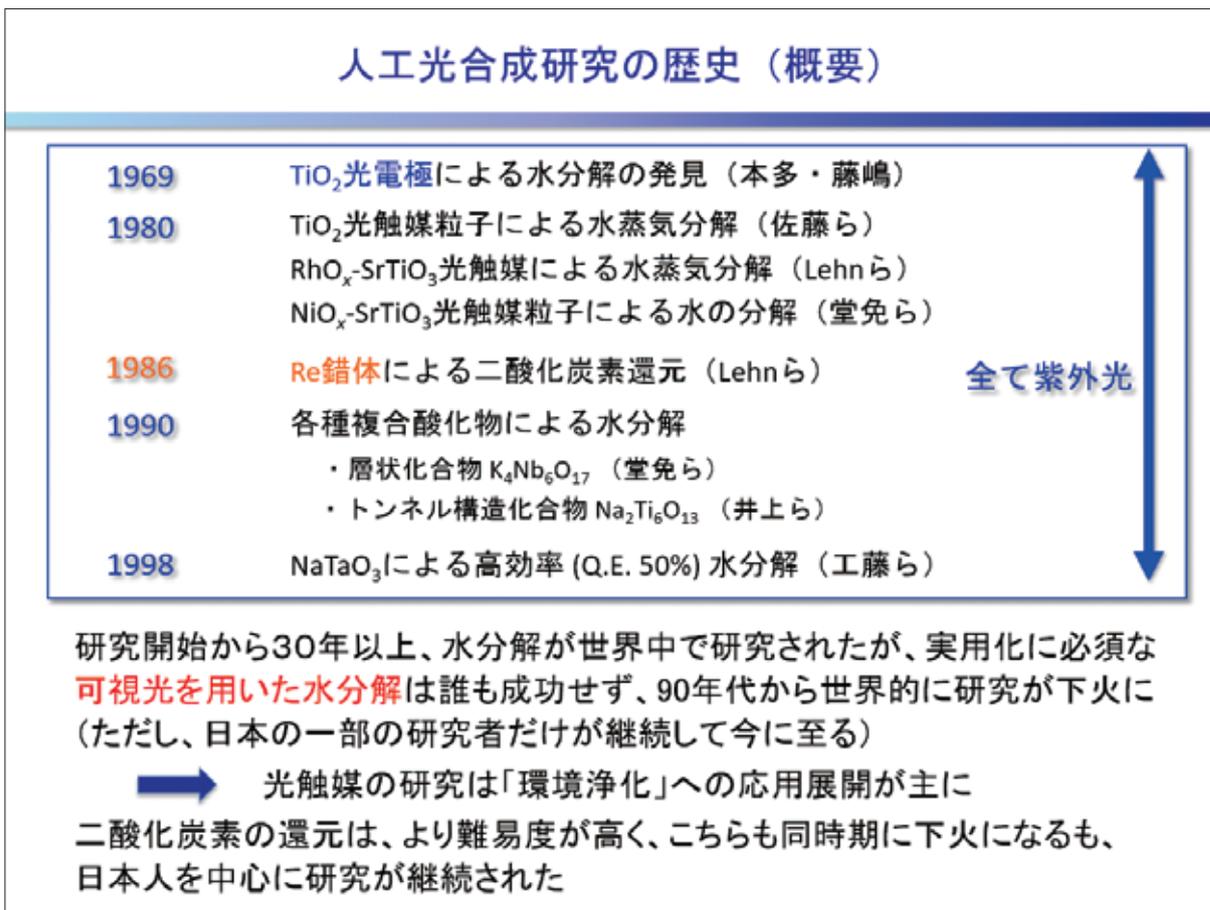


図 4-3-2

実用化のためには、太陽光スペクトルの 400 ナノメートル以上の可視光励起の光をいかに使うかということが最終的な効率を出すためには必須になってくる。この可視光を使うということが、人工光合成では非常に難しい（図 4-3-3）。

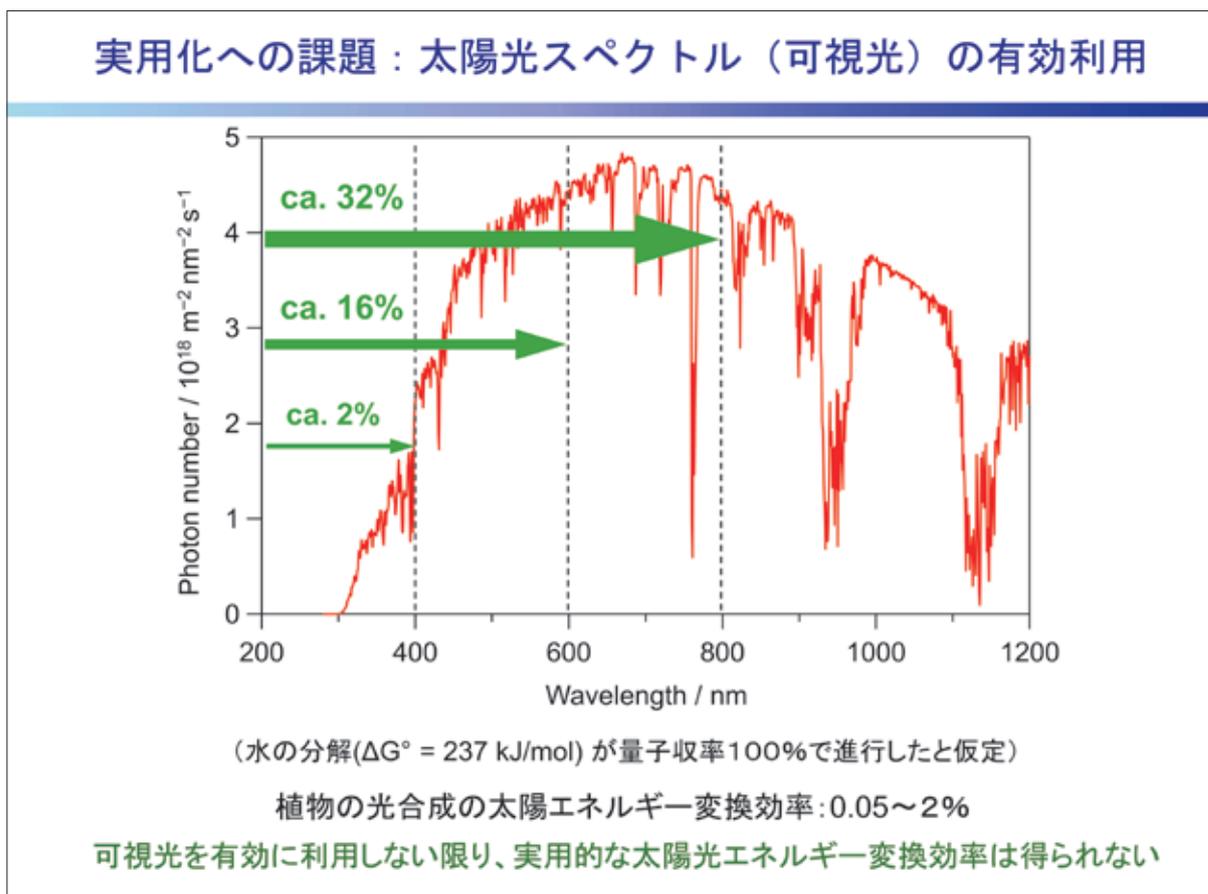


図 4-3-3

太陽電池では可視光領域のほぼ全領域を使っているが、なぜ人工光合成では可視光領域の光を使うのが難しいかというと、半導体のバンドのレベルと化学反応のミスマッチが一番大きい。現状の太陽電池と水電解装置を使えば、技術的には何も問題なく水素をつくることができる。実際、変換効率も太陽電池の効率に8掛けぐらいでできてしまうが、コスト的にまだ高いため、我々は非常に単純な系を使った粉末の光触媒、あるいはその粉末を塗った光電極系で水を分解する、二酸化炭素へ還元するというをやっている（図 4-3-4）。

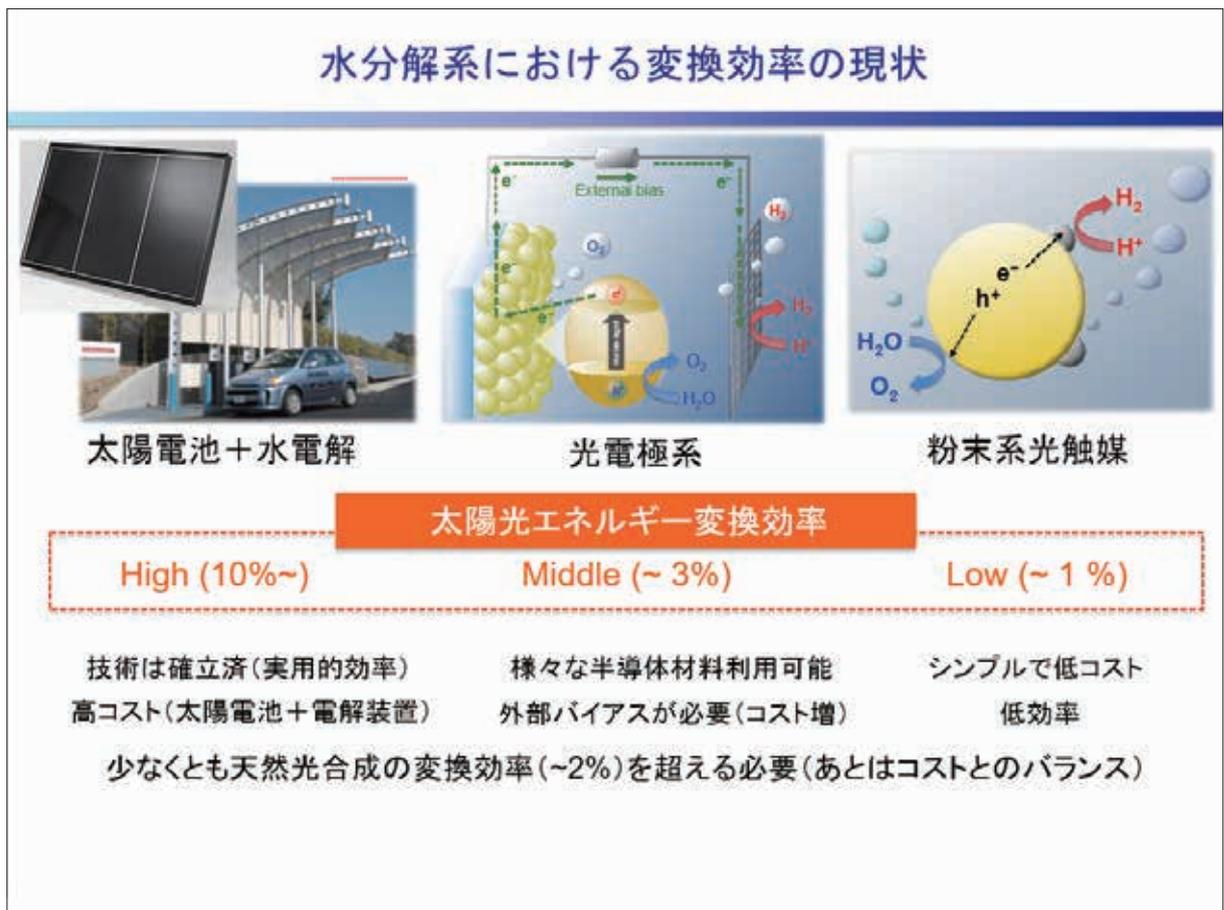


図 4-3-4

変換効率は、数年前までは惨たんたるもので、粉末系で 0.1 %、光電極系も 1 % といっていなかったが、この数年、3 年ぐらいで飛躍的に伸び、粉末系で 1 % ぐらい、光電極系では 5 % はいっているようだ。まだオープンにされていないがかなり上がってきている状況。実用化するためには、少なくとも天然光合成の変換効率を超えるぐらいは実証して、あとはコストとの兼ね合いになる。

例えば DOE の水素のターゲットの値段が、1 kg 当たり大体 2 ドルから 4 ドルというふうに定められている。太陽電池の値段が下がると話は変わるが、なかなか太陽電池やそれに類似したものではコスト的に見合わない(図 4-3-5)。ところが、単純な粉末の光触媒を使ってシステムを上手にやると、非常に低い価格で水素ができるだろうと言われているがやはり非常に難しい。

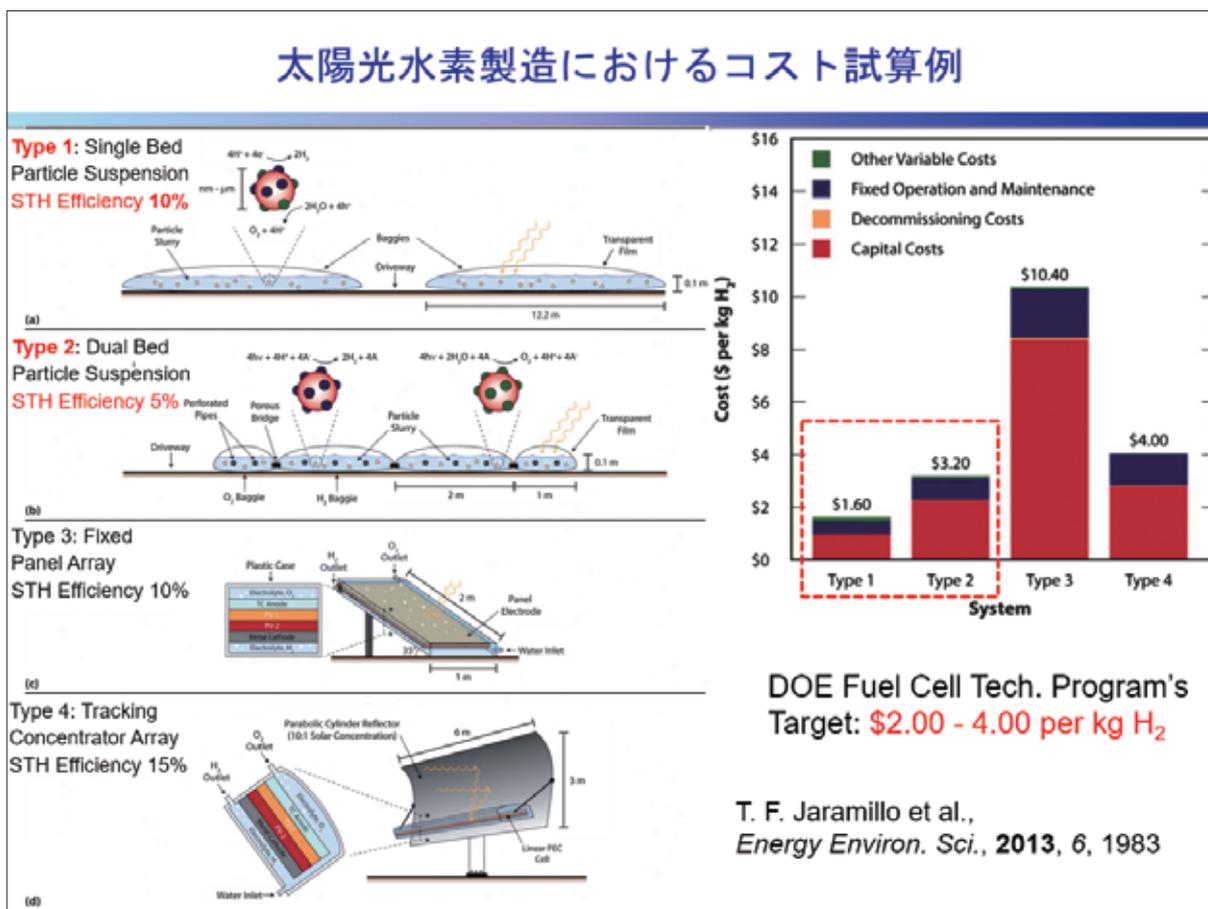


図 4-3-5

人工光合成は昔からやられているがいまだに実用化しない、何をやっているのかということについて、今回はここだけ強調しておきたいが、太陽電池を使うものと光触媒を使うものには大きな違いがある（図 4-3-6）。何かというと、太陽電池と水電解を組み合わせる場合、太陽電池は水に漬からない。太陽電池は外に隔離されているので、水を電解するだけの電圧（理論的には 1.23 ボルト、実際には 2 ボルトぐらい必要）を出してそれを電解装置につなげばいい。

ところが、光触媒では半導体そのものが水の中に浸漬されることになる。すると多くの場合、その半導体自身が腐食されて分解してしまい不安定ということが 1 つある。

もう一つは、化学的な話だが、この半導体がどういうバンドのレベルを持っていて、それが水の還元電位、酸化電位とどういう位置関係にあるかということが、本質的にうまくいっていないと反応が起こらない。ここが人工光合成系で一番の課題になる。安定性の問題と、半導体のバンドの位置と水の電解の位置。

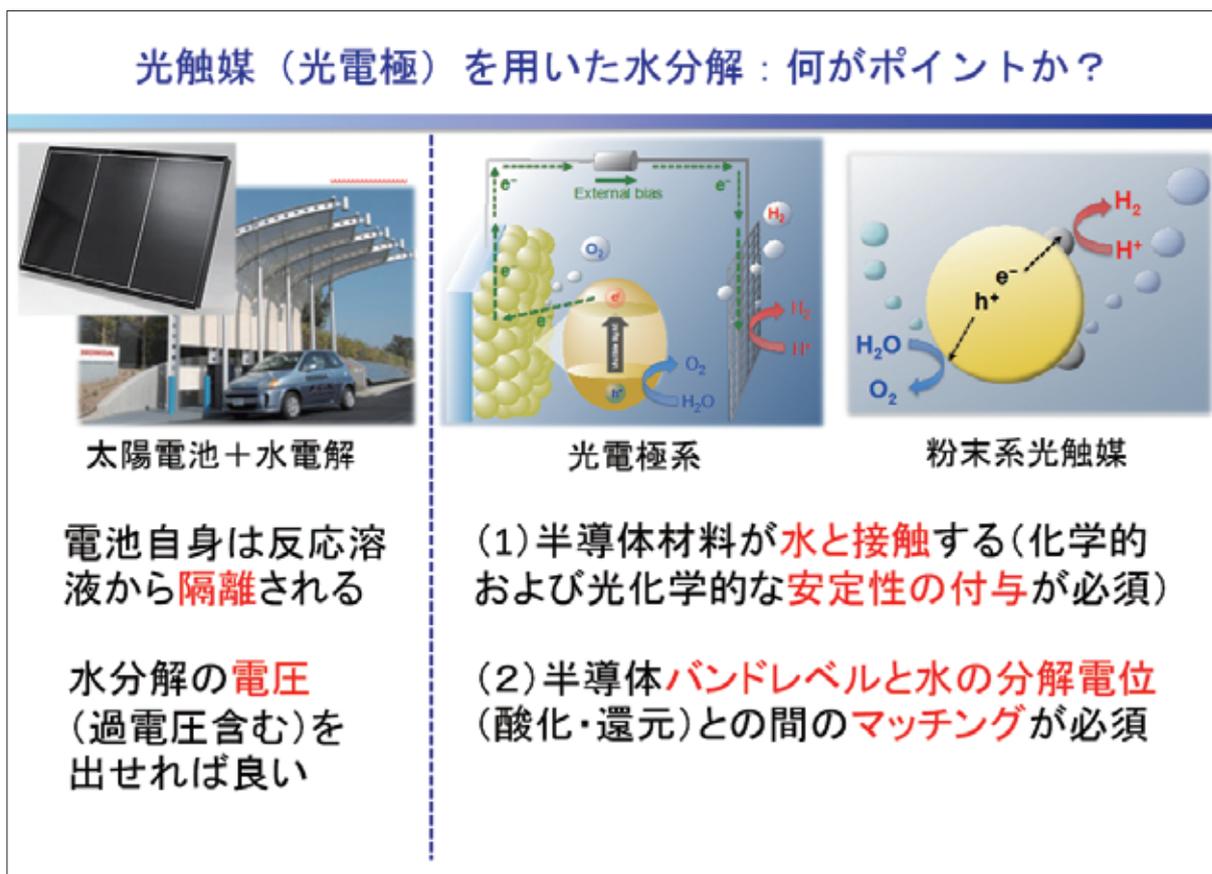


図 4-3-6

図 4-3-7 に示すように、水の還元電位、酸化電位は変えようがないが、半導体で水の分解をするためには、この価電子帯から飛び上がった伝導帯の電子が、少なくとも水の還元電位よりも高いエネルギーを持たないと、この反応は基本的には起こらない。

一方で、水の酸化は水から電子を引き抜くので、水の酸化電位よりも深い位置に価電子帯がなければならない。基本的には水の酸化電位を挟んだようなバンド構造を持っていないといけないということになる。バンドギャップが大きい、例えば酸化チタンなどは、これを満たしているが、我々はどうしても可視光を使わないといけない。可視光を使うということは、可視光でも励起される、つまり、バンドギャップが小さい半導体を持つ必要がある。ところが、可視光を吸収するような酸化物は幾つかあるが、ほとんど全て、バンドギャップを縮めると伝導帯の位置が下がってしまい、幾ら吸収しても水を還元できないということになる。酸化物は非常に深い価電子帯を持っているので、一方で非酸化物系の半導体、例えば硫化物、太陽電池に使われているようなものは、確かにバンド的には非常に良いものが多数あるが、水の中で光を当てると自分自身を酸化して、どんどん溶解して腐食が起こる。非常に不安定で酸素を出せない。

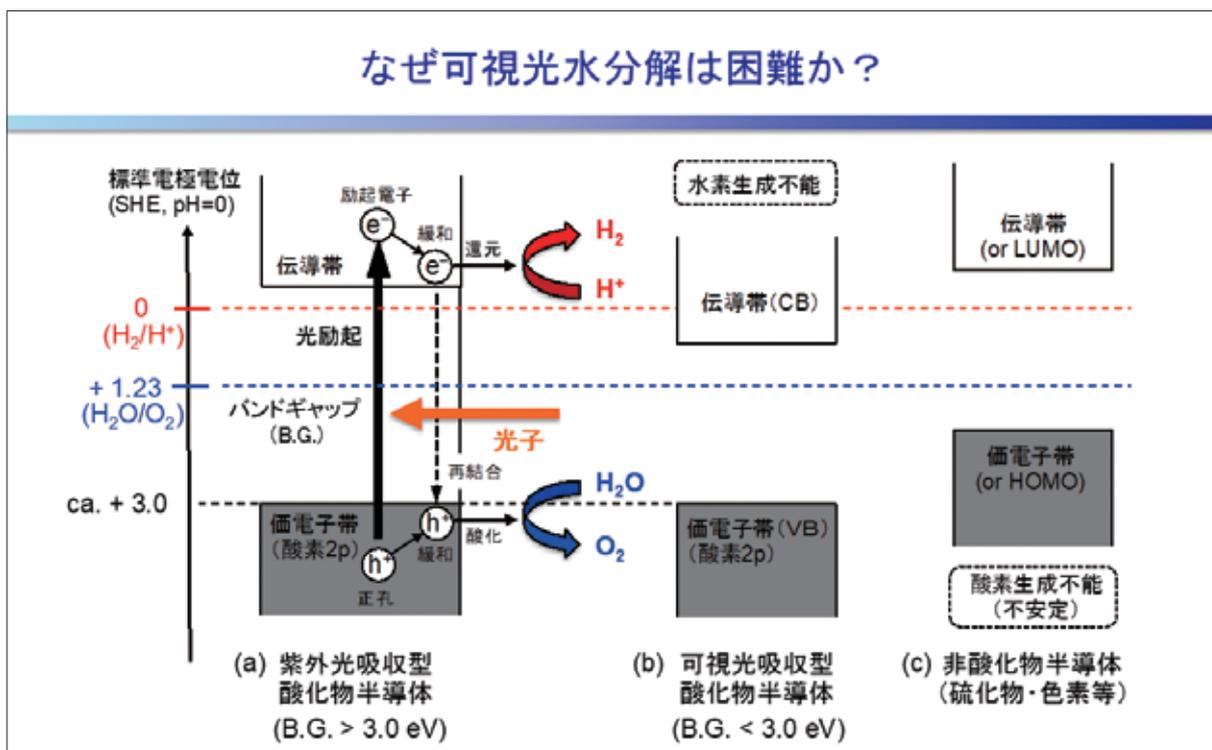


図 4-3-7

酸化物で非常に深い位置にバレンスバンド、価電子帯ができることは1980年から指摘されている。図4-3-8のグラフは、当時わかっていた金属酸化物のバンドギャップを横軸にとり、縦軸にフラットバンド電位をとっている。フラットバンド電位は伝導帯の下端より少し下にあるので、おおよそ伝導帯の位置を示していると思って良い。一部例外としてd-d遷移があるものがあるが、非常によい直線関係が見られる。この直線関係が何を意味しているかということ、酸化物である限り価電子帯が酸素でできているのでほとんど位置が変わらない。一方金属はカチオンを変えるとこちらは動く。このため非常に良い直線関係に出してくる。

バンドギャップは3.0よりも小さくないと可視光を吸収できないが、このルールに従うと、可視光を吸収できる酸化物の伝導帯は、全て水の還元よりも低いところに来てしまう。これが30年以上、破れないと思われてきた。それを破ったという例をこの後1つ説明するが、このように、酸化物では可視光では水を分解できないとずっと言われてきた。

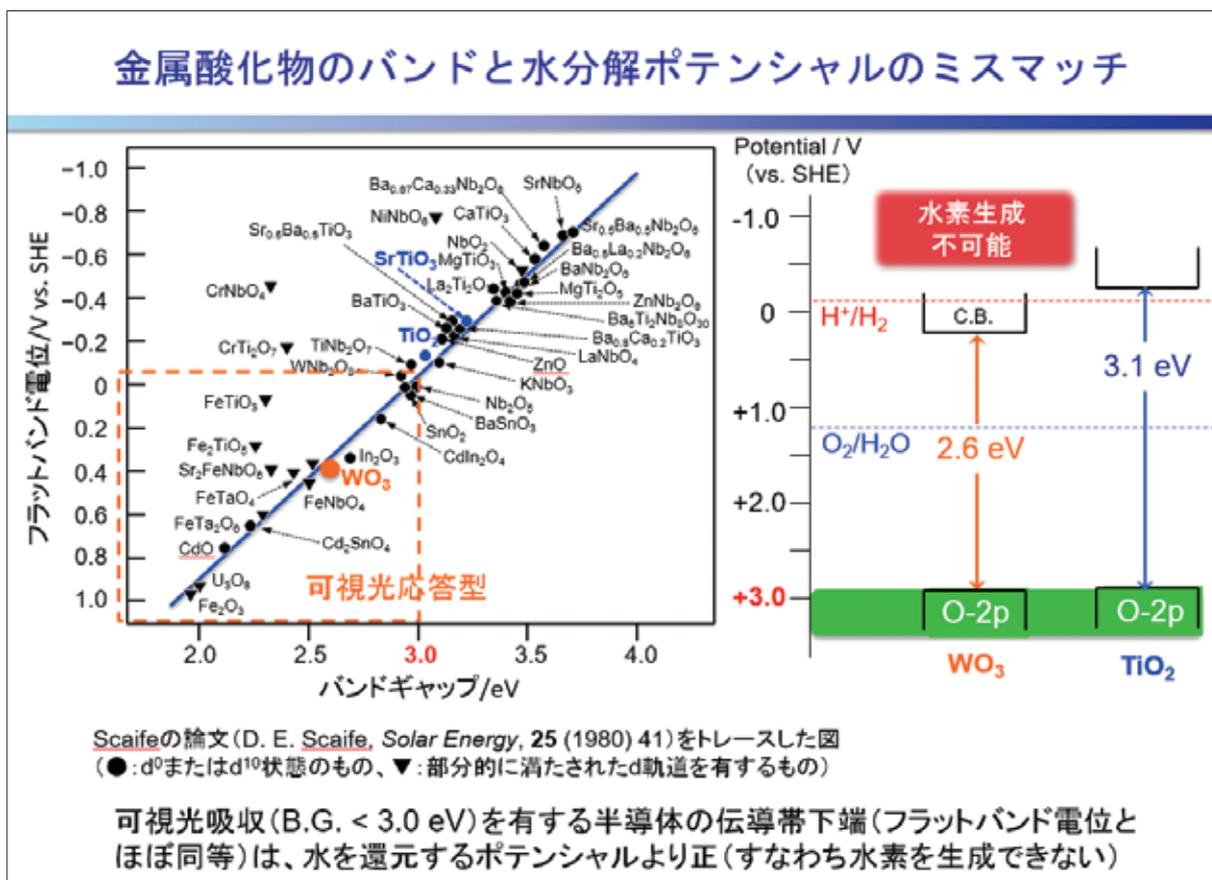


図 4-3-8

可視光を吸収する酸化物は還元力が不足している。非酸化物系は酸化力が不足している。したがって、当然思いつく戦略としてはこの2つをつなげようというコンセプトである(図 4-3-9)。酸化物で励起をして、不足した分をもう一度、非酸化物であげて励起し直すことで十分水を分解できるだろうというものである。

1 開会挨拶
 2 ワークショップ趣旨説明
 3 ファシリテーター説明

4 第一部 電力・エネルギーシステムシナジーの提案

5 第二部 総合討論

付録

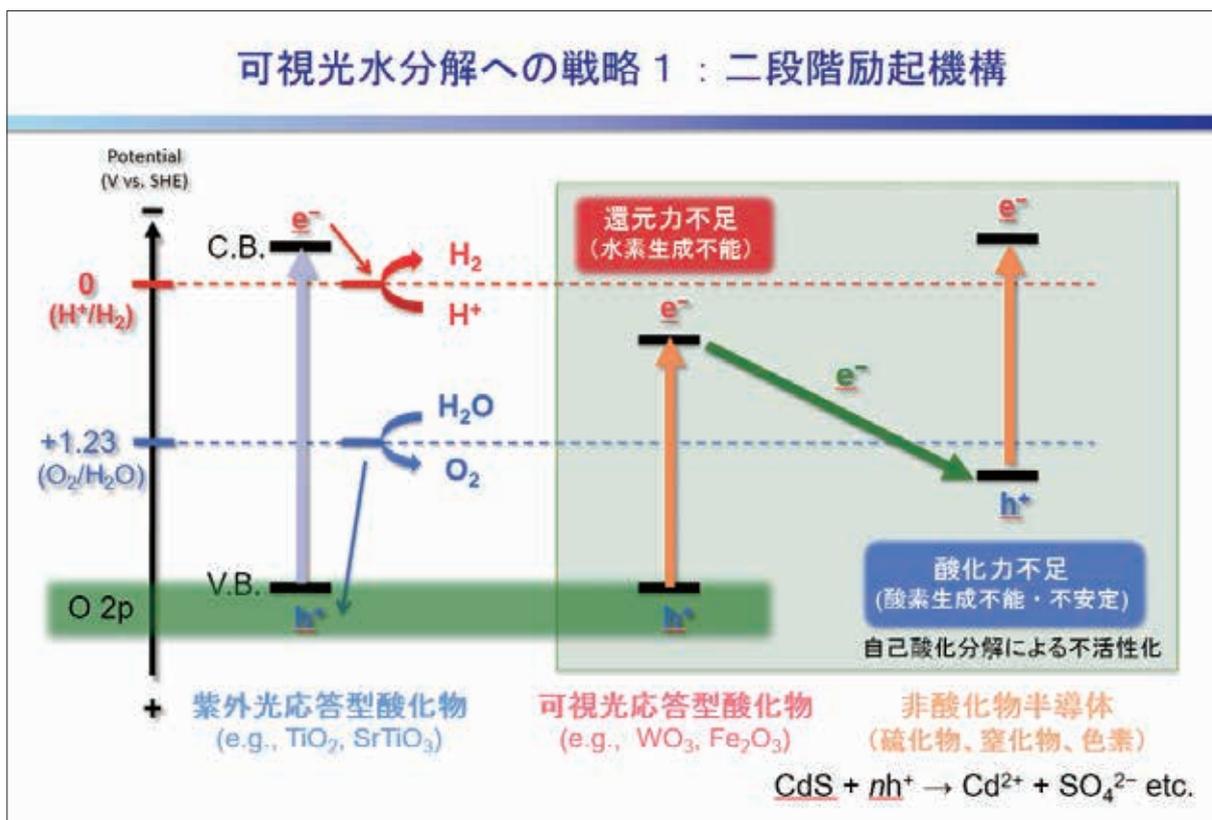


図 4-3-9

このコンセプト自体は 1980 年代から研究されていたが、最初の実証したのは我々のグループになる。いろいろな光触媒を組み合わせ、水から電子を引き抜いて可視光で励起して、この励起した電子を、例えばレドックスを使って、こちらに渡して、もう一度励起して水を還元するというをいろいろな材料系で実証している。これはまさに植物の光合成で行われている二段階励起、Z スキームと言われるものを模倣したものになる (図 4-3-10)。

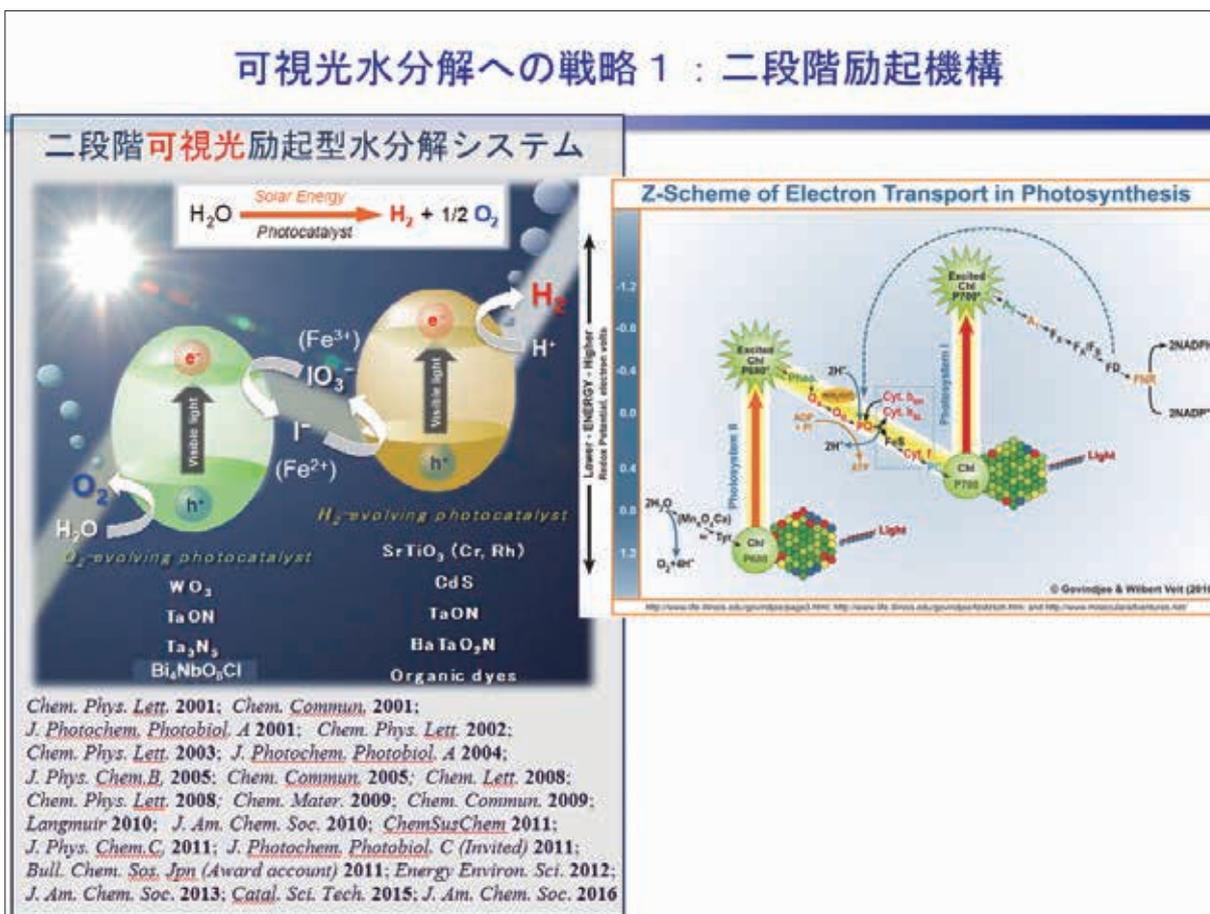


図 4-3-10

もう一つ、非常に大事なことは、電子を引き抜いて、最後非酸化物のほうに電子が来たとしても、この電子が我々の望んでいる水の還元に使われるかということ、そうではなく、逆に戻ってしまう逆電子移動が容易に起こる。植物は巧妙に、絶対に反対にいかないように設計されているが、我々が安易にこれをやると、大体逆電子移動が起こってしまう (図 4-3-11 左)。このため、図 4-3-11 右上のように表面にナノメートルオーダーの厚みの酸化クロムのシェルを巻いた白金を使って選択透過膜をつくり、プロトンだけ透過するようにしている。こういった工夫をすると、レドックスがあっても電子はプロトン関係だけに使われる。酸化のほうは、水の酸化よりはレドックスの酸化が起こるので、光触媒の粒子をつくる時に、右下のようにある特定の結晶面を出して、水の酸化のほうに有利な結晶面を出す。このようなことをうまくすると、この流れで水が分解できる。

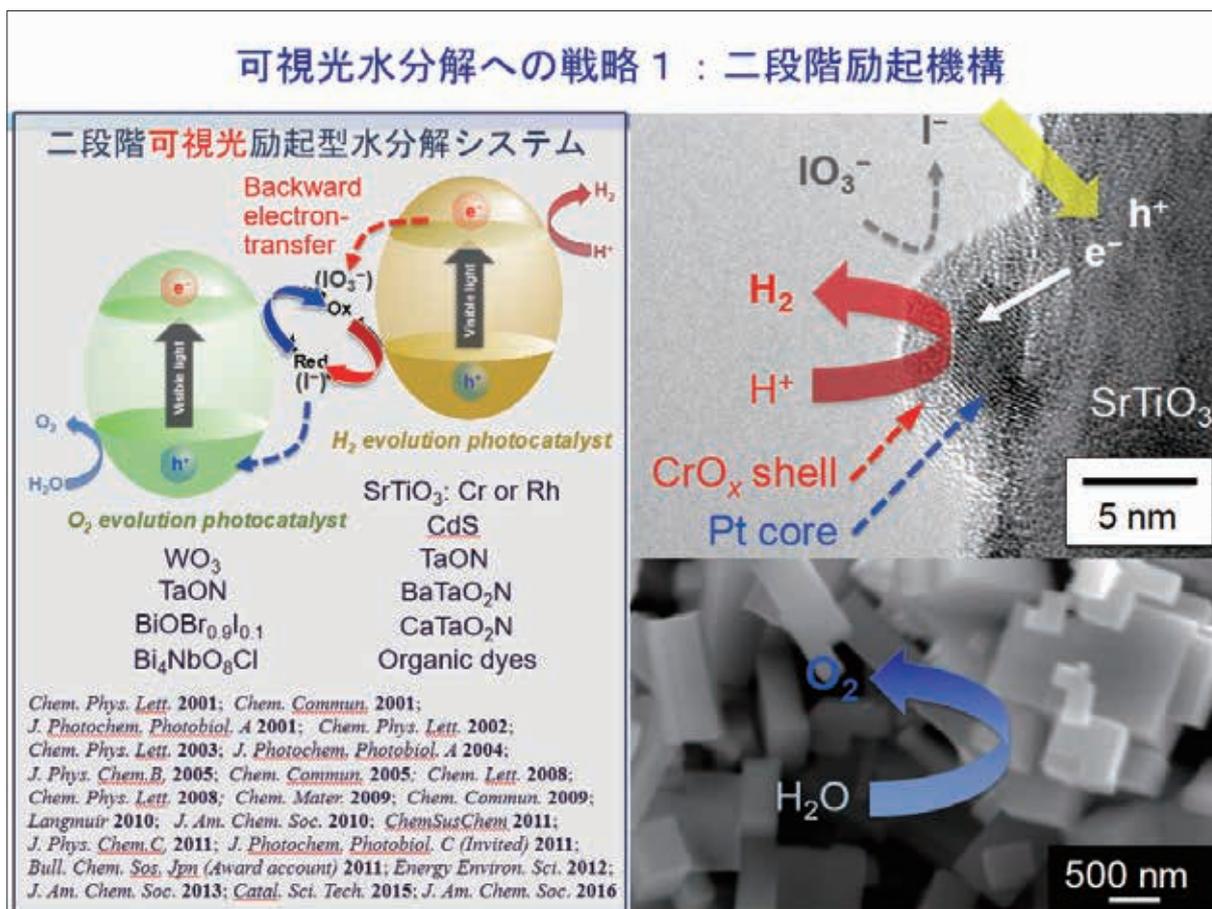


図 4-3-11

この機構の1つ良いところは、図 4-3-12 のように 2 つの光触媒を分けて、ガラスフィルターで仕切ってレドックスだけ行き来するようにしておくと、右から水素、左から酸素だけと、分けて出すこともできる。いずれ実用化した場合には、水素と酸素を分けないと貯めておくときに危険があるので、そのようなことにも使えるだろうと考えている。

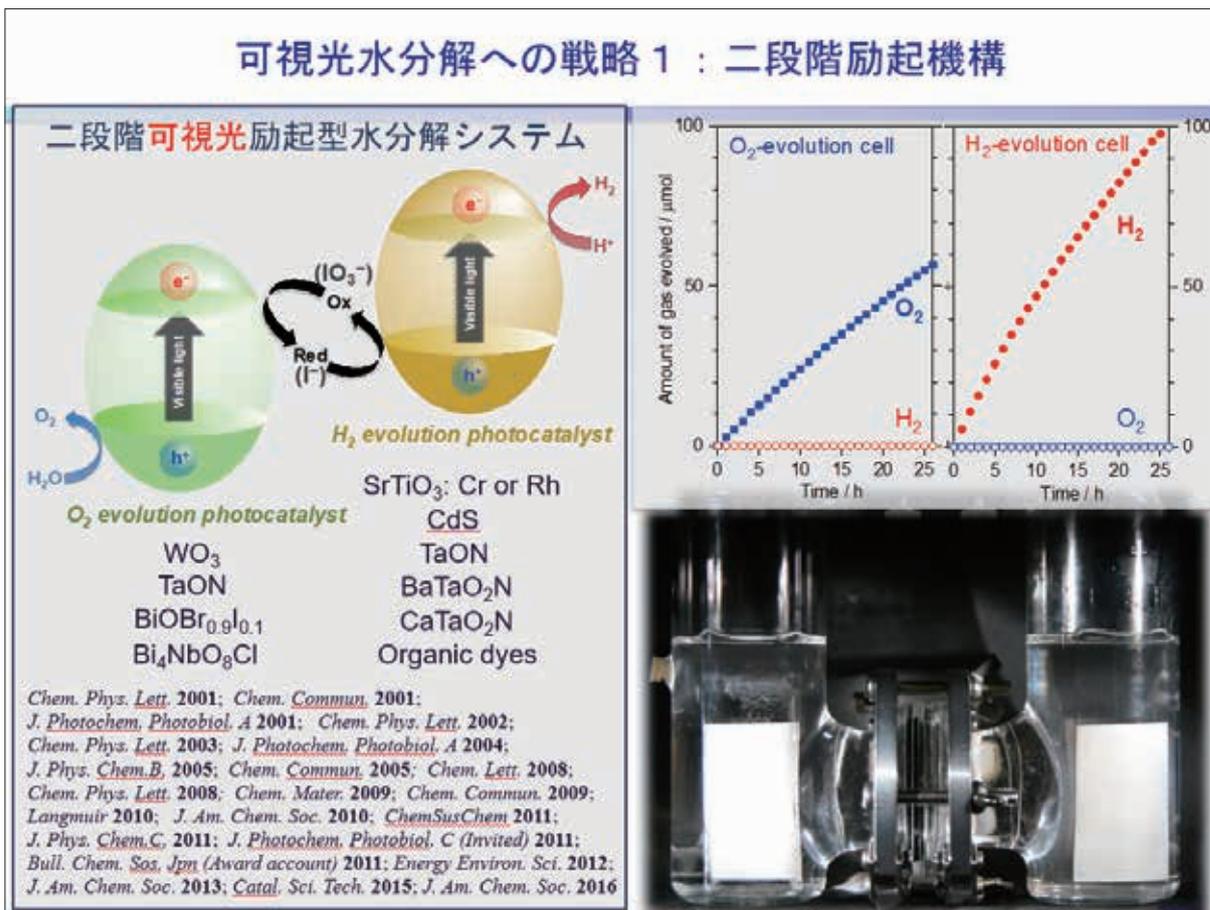


図 4-3-12

もう一つの戦略は、酸素の軌道が余りにも深過ぎるので、酸素以外の窒素や硫黄を導入して価電子帯を持ち上げてあげるといことも広く行われている。例えば、図 4-3-13 に示すタンタルと酸素と窒素、2つ混合アニオンを持ったものを使い、この黄色い部分はタンタルをある方法で塗布したものである。右から水素が出て、左から少し遅れて酸素が出てくる。まだ効率が低い、うまく塗布するだけでできるようなものも開発している。ここでも重要なことは、この表面にナノレベルで触媒をつけ、水の酸化をさせて働かせることである。

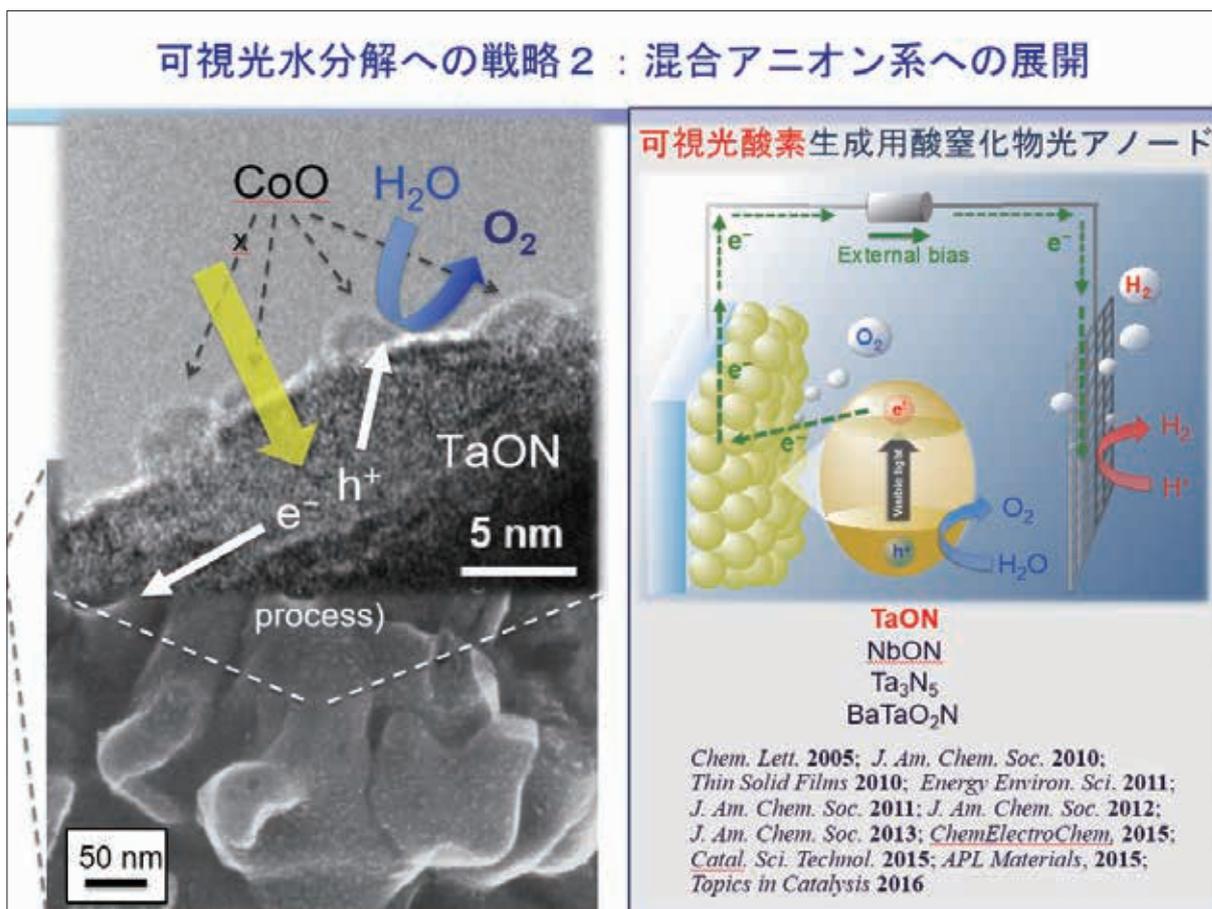


図 4-3-13

この電極、もしこのコバルトをつけないで光を当てると、最初だけ高電流が出て、20分するとほとんどゼロになり、あとは何も流れない（図 4-3-14）。酸素以外のアニオンを含むと自分の中でできた正孔は、その自分の中に入っている不安定なアニオンを酸化して溶け出す、もしくは表面を不活性化してしまうということが起こるため、もともと含まれている窒素がどんどん抜けてしまう。これに対し表面をコバルトで覆うとうまく自己酸化が抑制されるので、いかに表面を守るかが必要になる。

これは 60 分の間は安定だが、時間を延ばすと見事にどんどん低下していく。バンドギャップを縮めるために、今までは酸素の軌道が深過ぎるのでその上に不安定なエネルギーの高い別のアニオンを入れるという戦略をとってきたが、すると正孔は不安定なアニオンのほうに当然集まって、窒素を酸化して窒素を放出する、ということが起こり得る。これを変えないといけない。

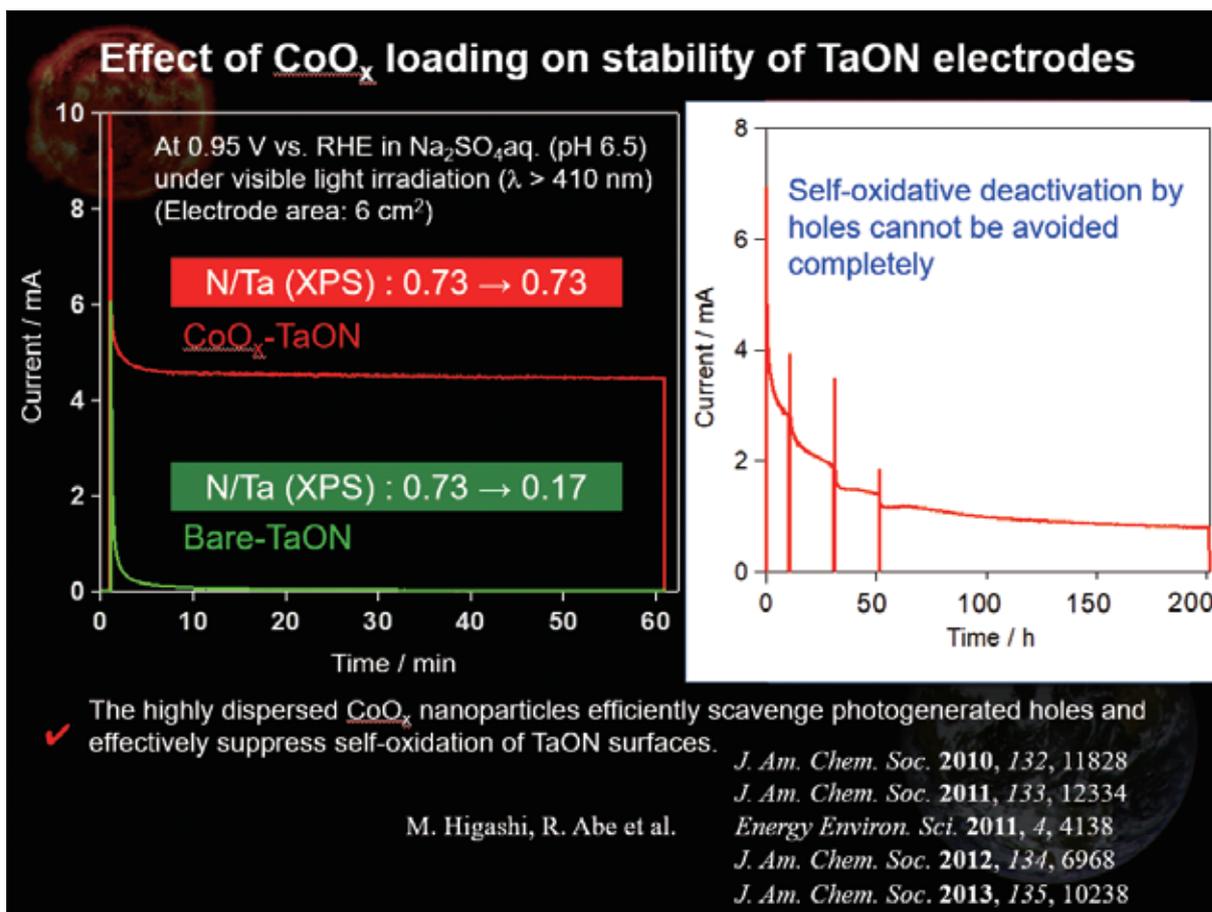


図 4-3-14

最近の成果としては、我々は難しいと思っていたが、CRESTで採択され同じ専攻の陰山先生とやったものがある。どちらかという陰山先生は物理寄り、我々は化学寄りで全然話は通じなかったが、学生も行き来させてやっていたときに出てきたものである。

簡単にいうと、今までのような別のアニオンが上に来ないで酸素が上に来てバンドキャップが縮まる、という現象を新たに発見した。今までの系よりも非常に高いところに価電子帯が来るので、非常に安定に水を分解できる (図 4-3-15)。

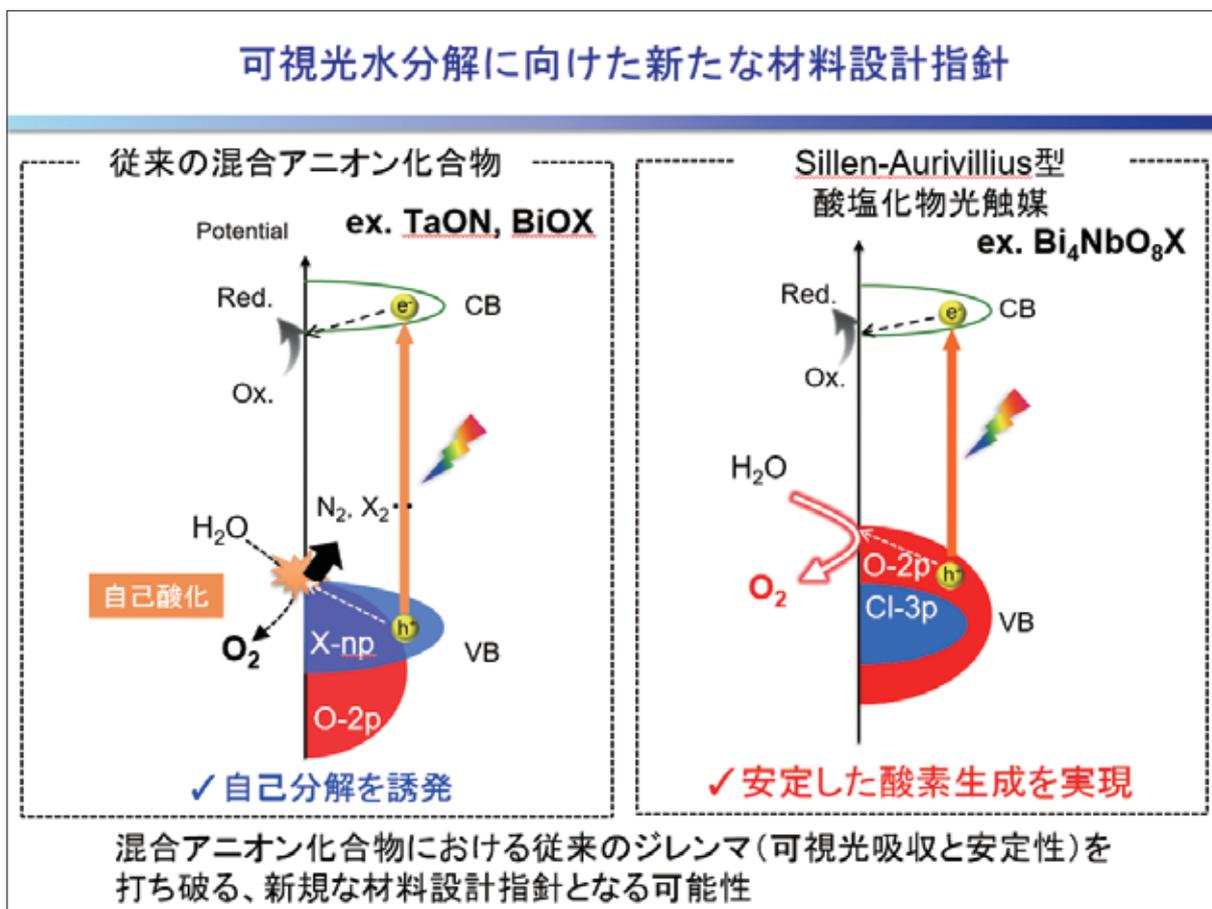


図 4-3-15

この系は今までの30年間、常識と思われたこのラインからかなり外れてくる(図4-3-16)。可視光でもかなり還元力を持っているというものが1つ出てきた。そうすると、次々と出てきて、ここに書いてある以外にも今まで誰も見つけられなかったものが発見できて、可視光でうまく水が分解できている。

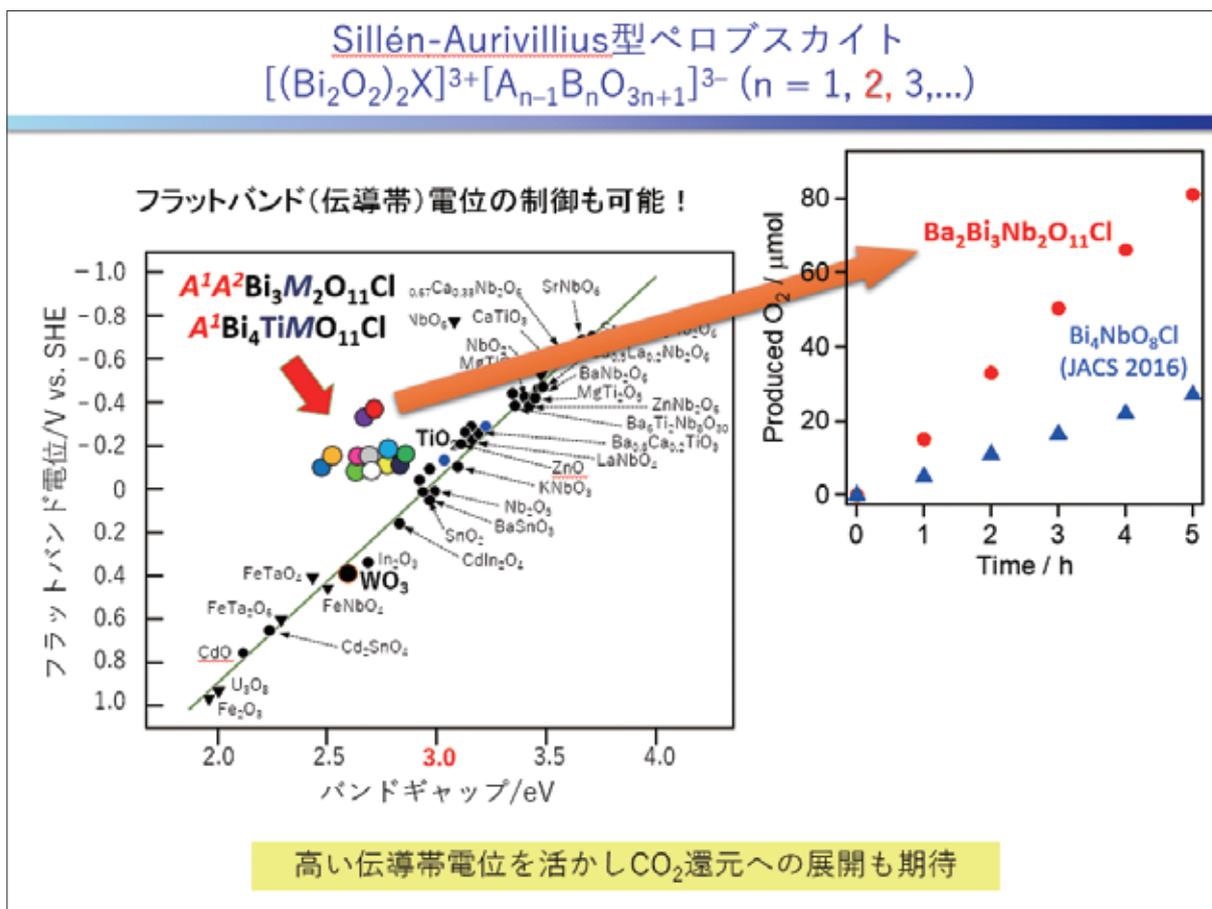


図 4-3-16

やはり異分野融合が非常に大事で、ずっと常識と思っていたけれども、お互いそれを打ち破ろうという努力をして新しいことが出てくるということが1つ言える。今まで常識的に、還元力を保ったまま可視光を吸収させようとするので酸素が深過ぎるので、別の不安定なアニオンを入れて何とか可視光を吸収させる、という手法をとってきたが、これは安定性が低下するというジレンマがあった。全く別の戦略でO-2pを上げるということが、結晶構造学的に可能ということが最近わかった。すると今までのものから外れるようなものが非常に多く出てきた。今これを使って水分解などを行っている。

日本はここが非常に強く、水の分解の系では我々が最初に二段階励起を産総研の佐山さんと一緒に実証したが、理科大の工藤先生は非常に材料開発で優れていて、80種類を超えるような可視光応答型の光触媒を独自に開発されており、世界で開発された光触媒の9割以上が工藤研で開発されているという状況である。

この2つの組み合わせで、堂免先生のグループがこのZスキームをうまく組み合わせ、1%を超えるような粉末系の光触媒パネルを作っている(図4-3-17)。

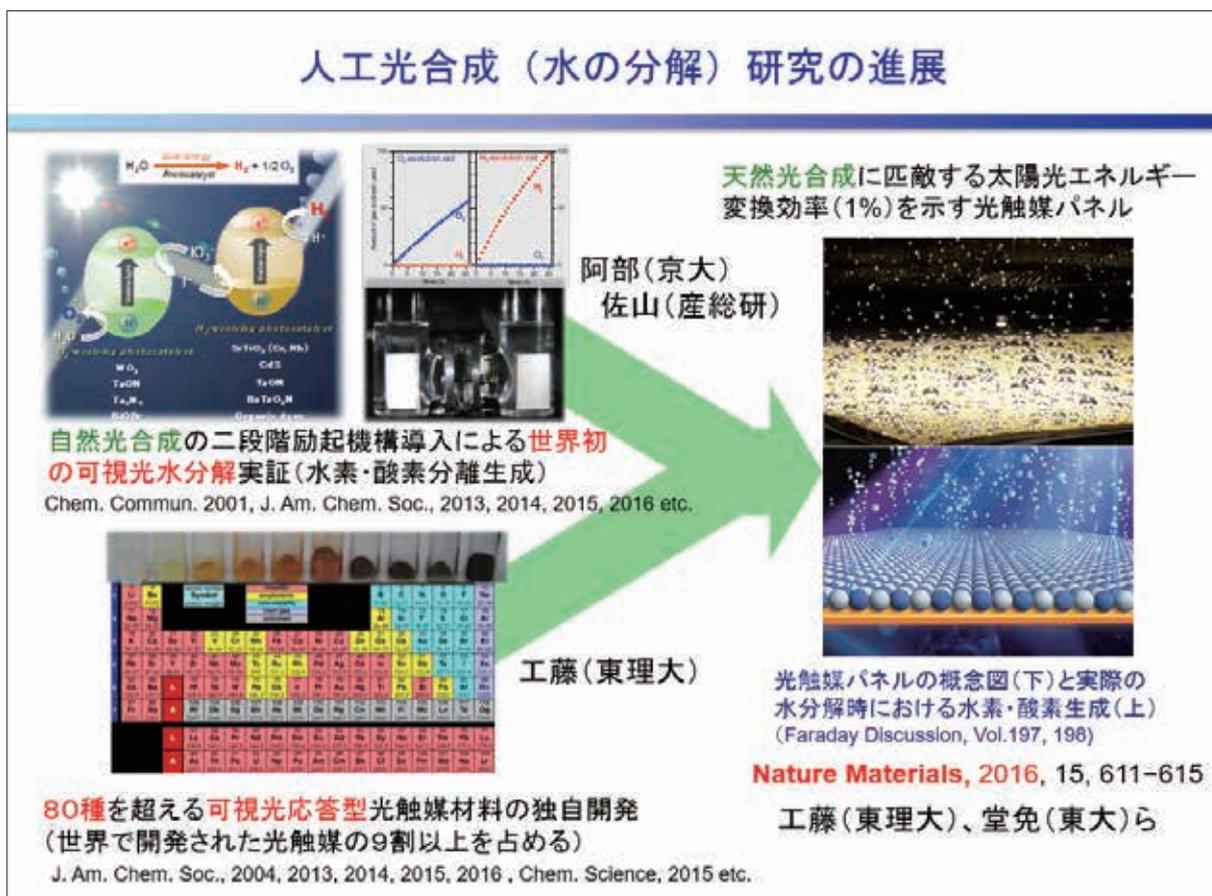


図 4-3-17

二酸化炭素還元の方も、昔は金属錯体が基本だったが、金属錯体は非常におもしろいが、水から電子をとることはできないので、東大の石谷先生の研究室と我々が共同で、世界で初めて可視光だけで、水から電子を引き抜いて二酸化還元を達成した。

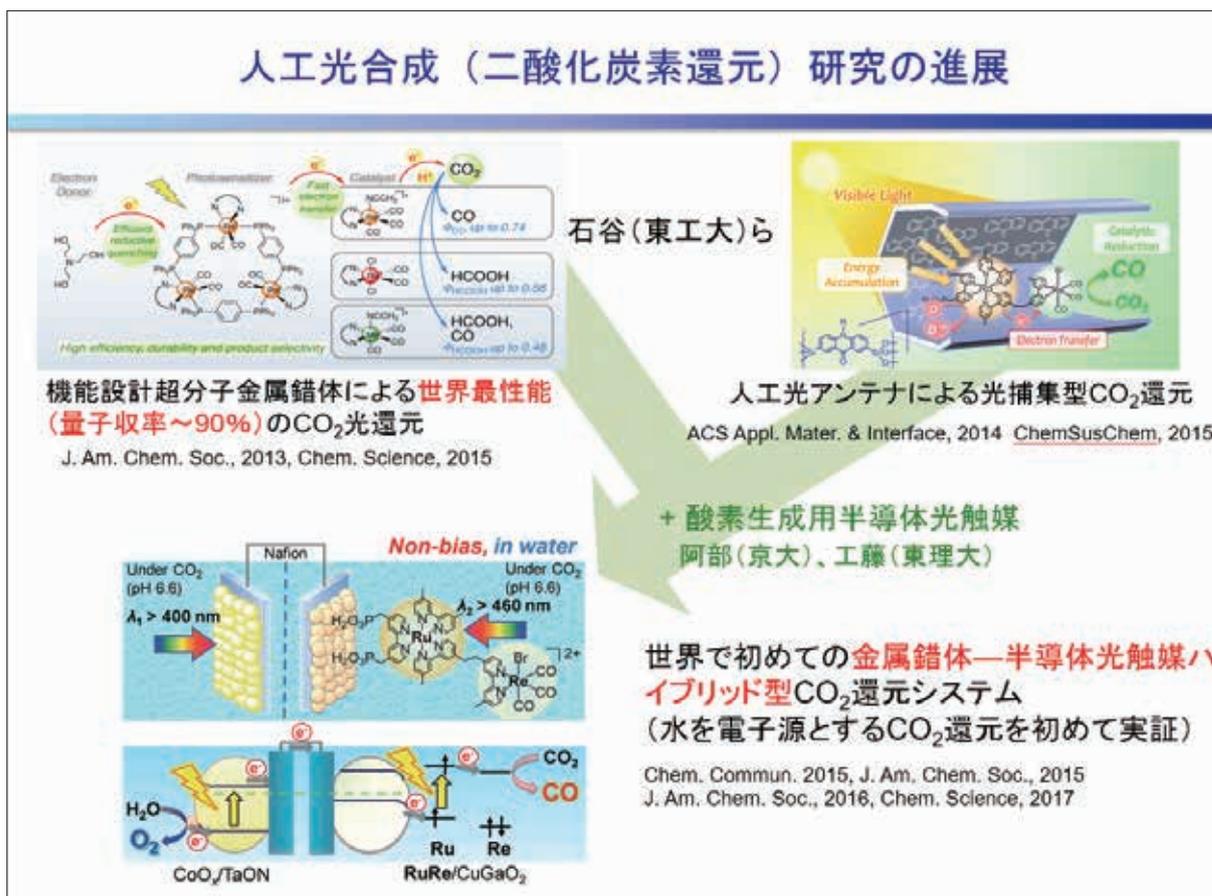


図 4-3-18

人工光合成も本当に人工でいいのかということで、最近、天然の光合成から学ぶことがあるだろうと考えた。新しく天然光合成と人工光合成を合わせたような新学術を提案し採択された。天然光合成は、沈先生がずっと謎だった光合成における水の酸化機構などいろんなことを解析されている。両方に携わっている計測分野の人を入れて、お互いに融合して、革新的なものができるれば良いということで進めている。

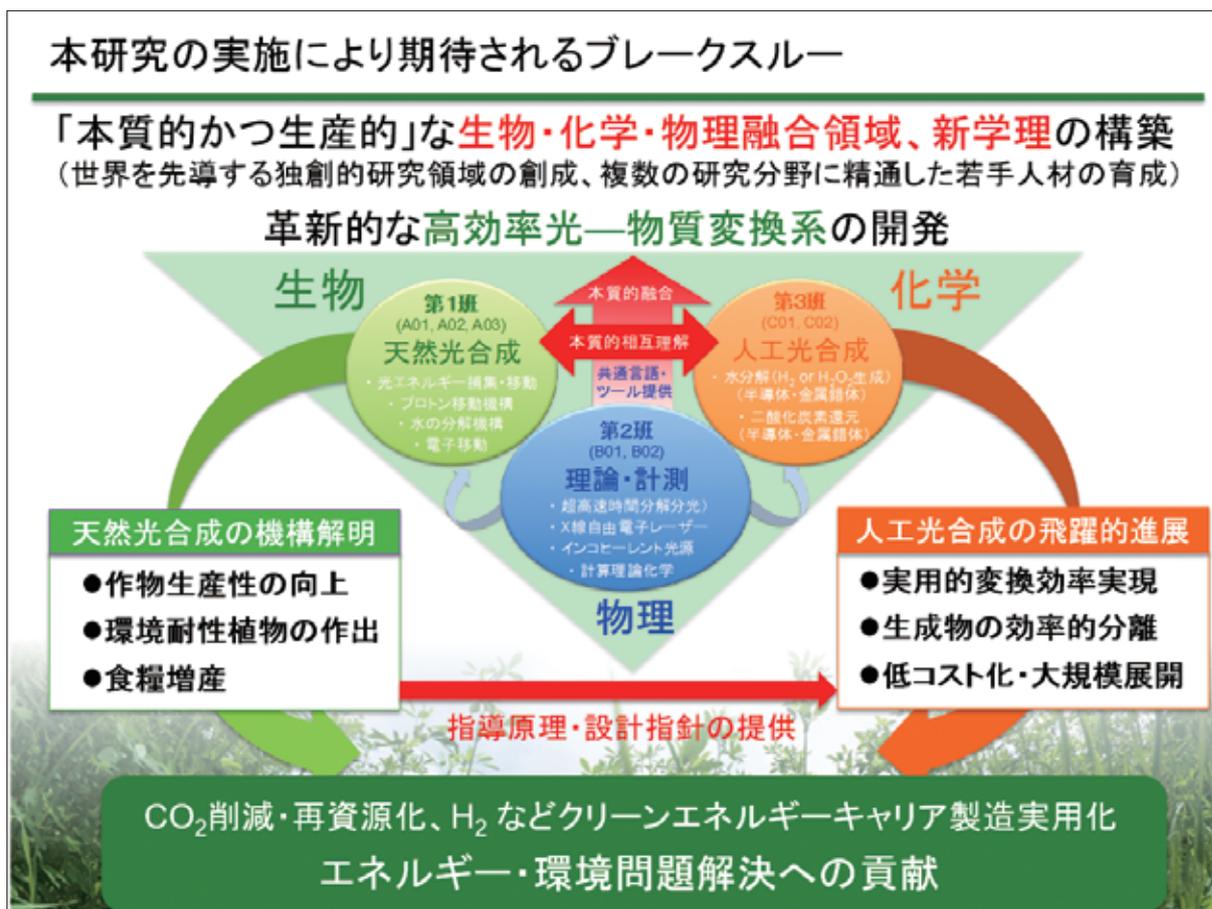


図 4-3-19

【質疑応答】

Q : 図 4-3-4 で、変換効率 3 %、1 % となっているが、直観的に考えると、電極のところで起きる反応、それから粉で起きる反応、つまり二次元的な電極では表面だけに対して、粉のほうは三次元、全部から出てくるだろうと、それも込めての効率なのか。電極の配置によって、いろいろ変わってくるのではないか。

A : 変わってくる。いいところをとって、こういう感じ。

Q : 粉末系の場合には、水素と酸素が同じところから出てくるのか。

A : 粉末系ではそうなる。我々が提案している Z スキームで分けることは可能。ただ効率はやはり落ちる。図 4-3-12 のように粉末をガラスフィルターで分けて、レドックスだけ行くようにする、あるいはガラスの板の上に固定すると、確かに水素、酸素と分かれて出てくる。ただ、レドックスの移動や、レドックスへの逆反応が、まだ完全に抑え切れてないが、こういうものもありと考えている。

Q : 新しい材料で、ゴールドルールから外れるもの。これは酸化物の化合物なので、酸素の p 軌道がどうなるかとか、バンド計算すれば出てくる。そういう手法でシミュレーションベースにいろんな新しい材料が見つかるものなのか。先生は実験で見つめられた。

A : 実験から見つけている。バンド計算もちろんできるが、私も専門ではないが、どういう元素から構成されているかというのは正確にわかるが、バンドキャップはまだ正

確に見積もれない。あとは位置。位置はバンド計算から出てこない。したがって、いろいろな実験とバンド計算、両方を合わせるとこうなると理由がわかったので、それに従って作っている。もうどんどん出来てきたというところだ。

Q：天然の光合成での、上に上がった電子は逆流しないというような自然界のうまい仕組みを、どのくらい人工的に持っていける、モデル化できるという見通しはどうか。

A：個人の考えだが、天然光合成はいろいろなことがわかってきているが、そのまま真似するのは多分不可能。こういう配置にあるから電子移動がこっちに行くとか、そのようなヒントを得る。指導原理とか設計指針をここから得る、と考えている。

Q：最近、ISOでも定義がされたが、生物系の機構をモデル化して、その原理に従って人工的にそれを起こすというのが、やはり王道になりそうか。

A：このまま人工光合成の研究を続けても恐らく上がっていくと思うが、一步、ぽんと上がるためには、やはり何か入れないといけないと考えている。

Q：その進化の過程で出たうまいメカニズム、多分、偶然できたと思うけれども、そこを解明していくと、結果的にはゴールに早く着くのではないかと思うので、ぜひ頑張っていたきたい。

4.4 燃料電池 高効率・高耐久性を実現する材料・デバイス開発

八代 圭司（東北大学）

燃料電池にはいくつかタイプがあり、大きくは高温型と低温型、低・中温型と分けられる。図 4-4-1 に示すが、高温型のほうは貴金属触媒が不要、かつ高効率であるのに対して、低・中温型は取り扱いが容易で、車に使われるようなものである。しかし現状、白金等の貴金属が必要になる。

		高温型			低・中温型	
種類		固体酸化物形	溶融炭酸塩形	リン酸形	高分子形	アルカリ水溶液形
電 解 質	電解質材料	安定化ジルコニア	炭酸リチウム+炭酸カリウム	リン酸	イオン交換膜	水酸化カリウム
	イオン導電種	O^{2-}	CO_3^{2-}	H^+	H^+	OH^-
	比抵抗	~1Ωcm	~1Ωcm	~1Ωcm	~20Ωcm	~1Ωcm
	作動温度	~1000℃	600~700℃	180~200℃	80~100℃	50~150℃
	腐食性	—	強	強	中程度	中程度
使用形態	薄膜状	マトリックスに含浸	マトリックスに含浸	膜	マトリックスに含浸	
電極	触媒	不要	不要	白金系	白金系	ニッケル・銀系
燃料		水素、炭素水素など	水素、炭化水素など	水素	水素	純水素
効率		45~60%	45~60%	40~45%	35~45%	60%
問題点・課題		耐熱材料・起動性	耐食材料・CO2循環系	高価な触媒、寿命	水分管理、高価な触媒、寿命	CO2による電解質の劣化、純水素の供給

高効率
取扱容易

図 4-4-1

燃料電池の効率は、図 4-4-2 に示すように基本的にはギブズエネルギーとエンタルピーの比として決められる。これを見ると、理論効率をプロットした形になっているが、こちらのエンタルピー分のギブズエネルギーということになり、理論効率は低温ほど良い。

ここに、これは水素で燃焼させたときでのベースで考えている、カルノー効率もプロットしてあるが、カルノー効率が超えてくるのは 1,000℃あたりで、基本的に低温のほうが理論効率としては良い。

しかし、実際には反応の抵抗があり、内部抵抗になっている。これによって低温では反応が進まないのので、実効率としては高温型のタイプのほうが良い。これにより前述のような、まとめの評価が出てきている。

また、セル構造としては、電解質がアノード、カソードに挟まれているサンドイッチ構造である。

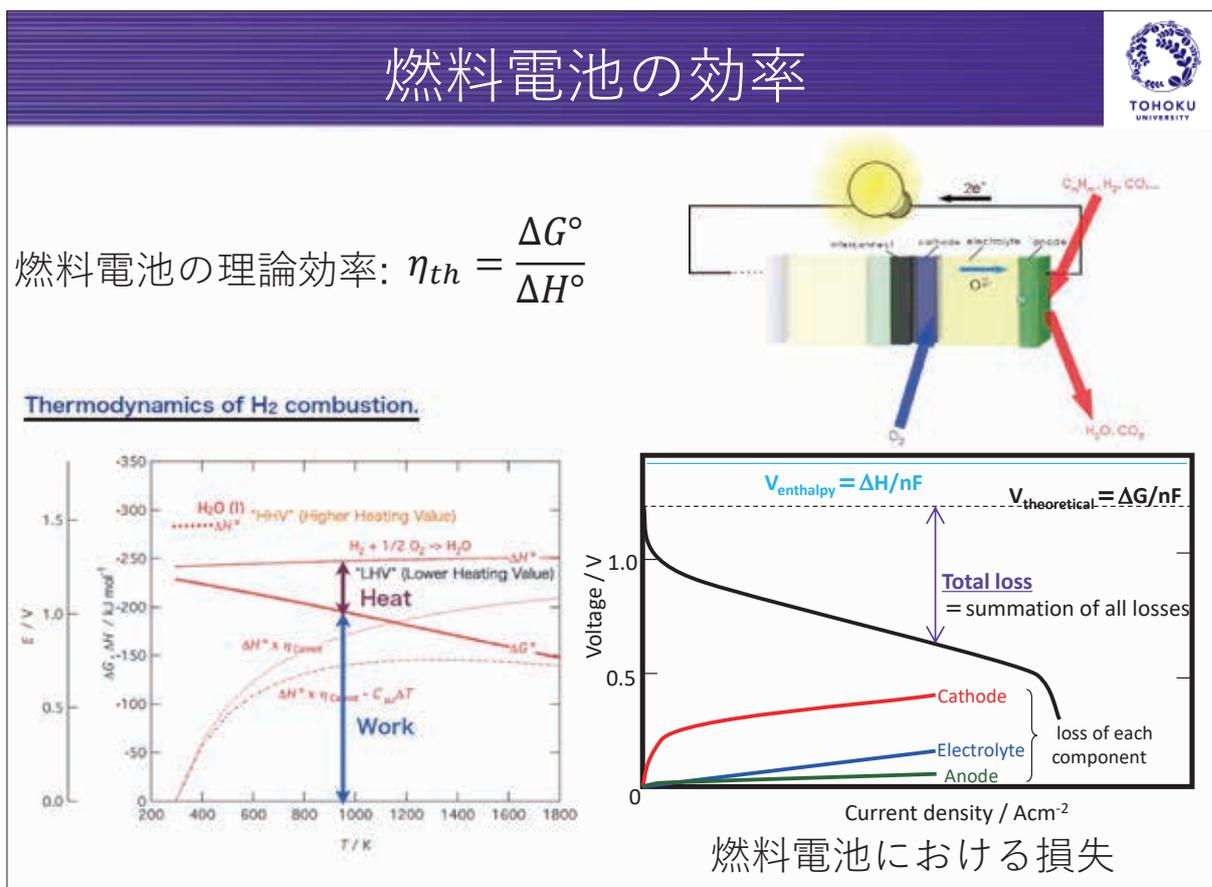


図 4-4-2

現状の高温動作型の燃料電池の効率について見てみる。国内では 52 % (LEV) という発電効率のエネファーム typeS という家庭用燃料電池が商品化されている。

海外では、イタリアの会社である SOLIDpower 社が、BlueGEN という 1.5kW の燃料電池、家庭用規模ぐらいのものを考えている。図 4-4-3 のデータを見ると、赤が昔のモデルで初期は発電効率が LHV で 60 % と高いが、経時劣化が大きい。青の 2014 年モデルでは経時劣化が改善されて、LHV で 60 % の効率が、2 万時間はほぼ維持できるという報告が 2017 年の夏の発表にされている。

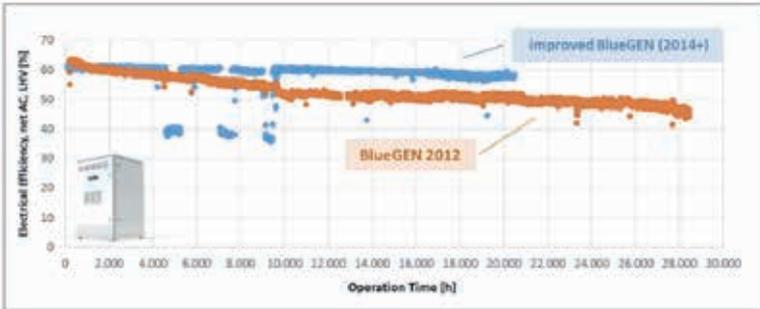
これは、2,000 台いかないぐらい、多分、今テスト的に市場に出回っているというようなものである。

もう 1 つが、Bloom energy というアメリカの会社の燃料電池。これは効率が LHV で平均 53 % というでカタログ仕様になっている。初期は効率 60 % 出せる。世界的な潮流では、どこもより高い効率で電気を発電する高効率であることを重視して、開発が進められている。

現状：海外の高効率SOFC

SOLIDpower社
BlueGen 1.5kW system

効率:~60%(LHV)



Ref. ECS Transactions 78 (1) 117-123 (2017)



Bloom energy社
Bloom energy server 5
200-250kW system

効率:平均53%(LHV)
初期値60%



Ref. Bloom energy Japan製品データシート

図 4-4-3

今後の発電効率のさらなる向上の可能性について図 4-4-4 について示す。

基本的には多段化して、1回、燃料のリサイクルを行う。1段当たりで使う燃料利用率としては高くないが、2段で使うことで総合的な、最終的な燃料利用率を上げる。

また導電イオン種が酸化物イオンかプロトンかも重要で、燃料利用率に違いがでてくる。酸化物イオン導電体の場合、生成物である水が燃料極側に出てくるため、燃料が希釈されてしまう。これにより、電位が酸化側にシフトしてしまう。プロトン導電体の場合は、空気極側に水が出てくる形になり、燃料を原理的にはぎりぎりまで使い込むということが可能になる。そういうことで、超高効率化ということを考えると、プロトン導電体というのは一つの良い材料ということになる。

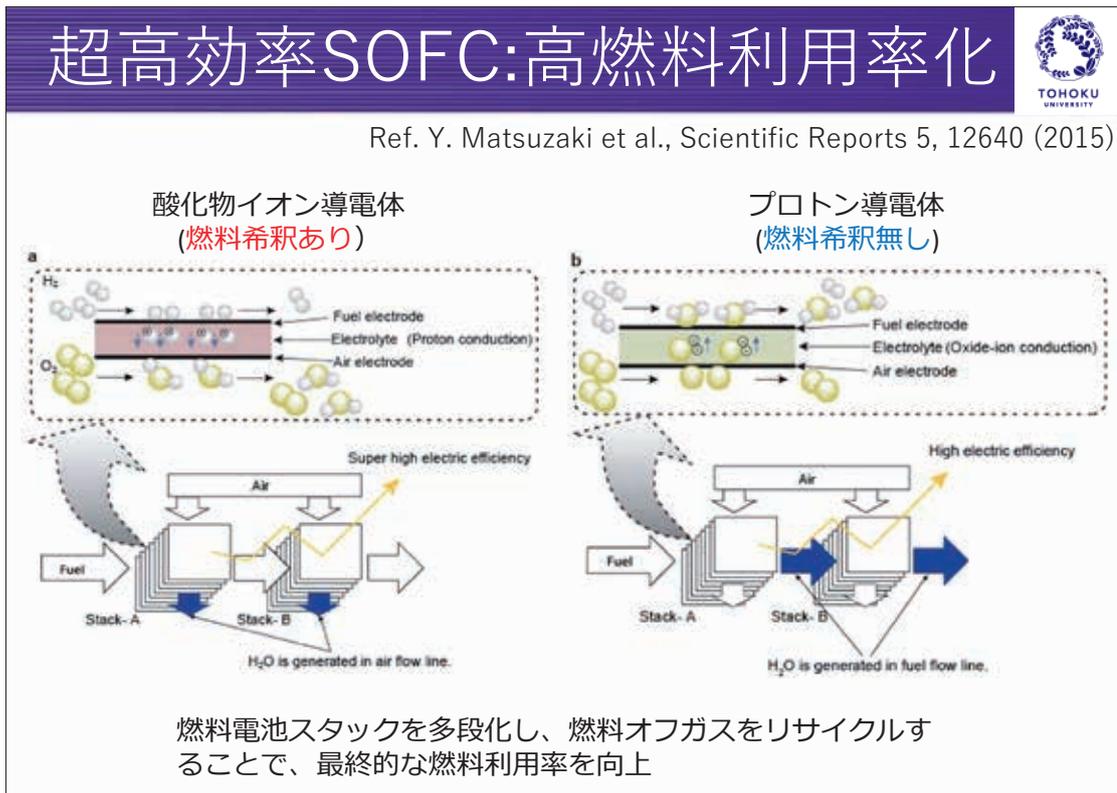


図 4-4-4

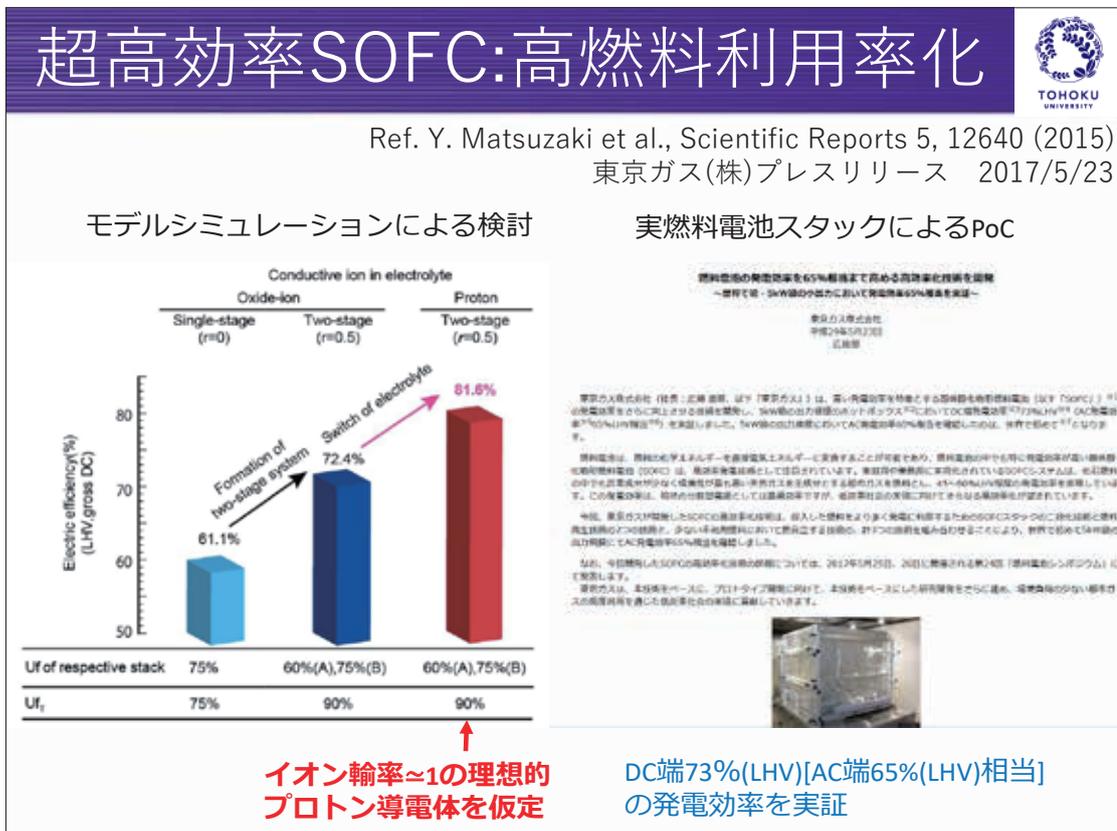


図 4-4-5

図 4-4-5 に理想的なプロトン伝導体があったときの発電効率の試算を示した。

しかし、実際、今使われている高温型のプロトン導電体というのは理想的なイオン輸率が 1 の電解質ではない。プロトンだけで電気を運ぶイオン輸率が、作動条件下で 1 であればよいが、どうしても空気側のところ、酸化側のところで輸率が下がる。すると電解質効率（電極を含まない電解質だけの効率）が、例えば 600 °C、 0.1 Acm^{-2} の条件で $\text{BaZr}_{0.8}\text{Y}_{0.2}\text{O}_{3-d}$ を使うと電解質厚さ $100 \mu\text{m}$ で最大値 0.75 をとる。この時点で、最大で 75 % の効率しか出ない。そうすると当然 80 % というのは無理になる。プロトン導電体でいかにこの電解質効率が高いか、つまりイオン輸率が、燃料電池を使うウィンドウで、ずっと 1 を維持してくれるような材料開発が必要になる。

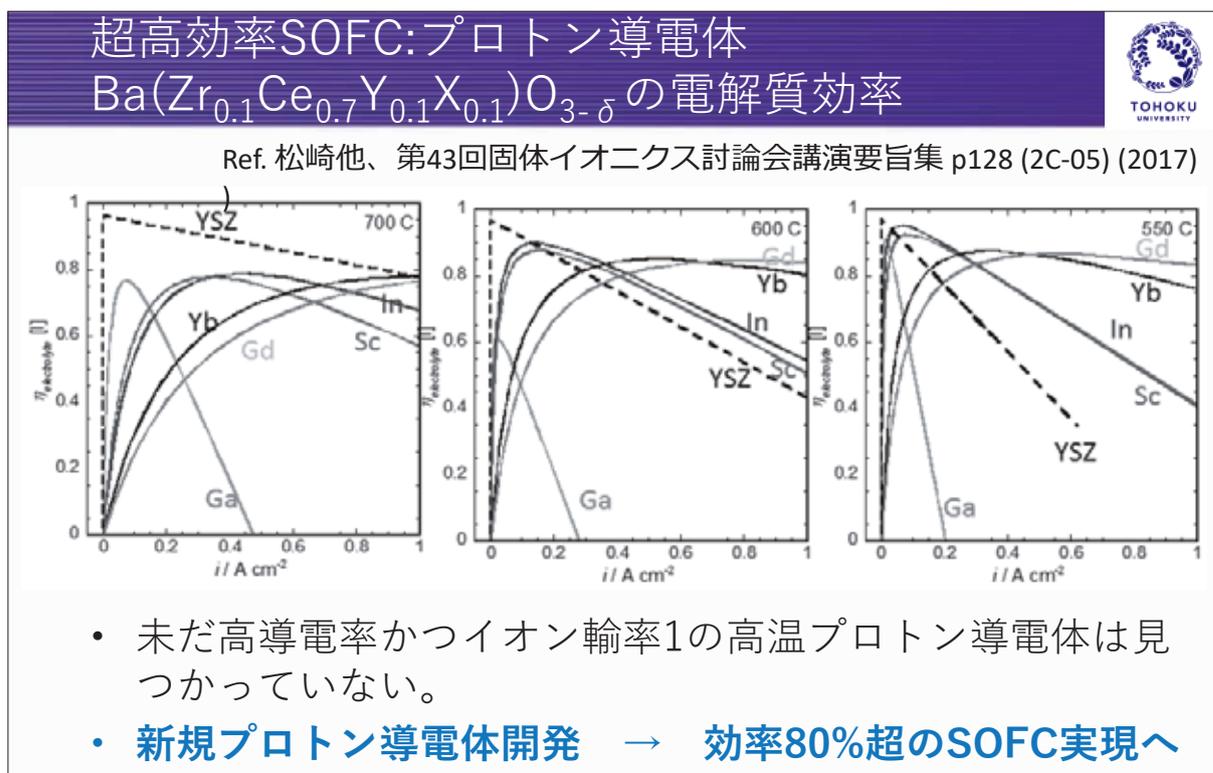


図 4-4-6

図 4-4-6 では現状の電解質効率の例を示している。

今後の課題は、次の 30 年間、何かやるべきというような、方向として、材料、デバイスという意味で考えると、新規のプロトン導電体で、特にイオン輸率が 1 になるようなもので、効率 80 % 強の SOFC というのを考えていくということが、一つの方向としてある。

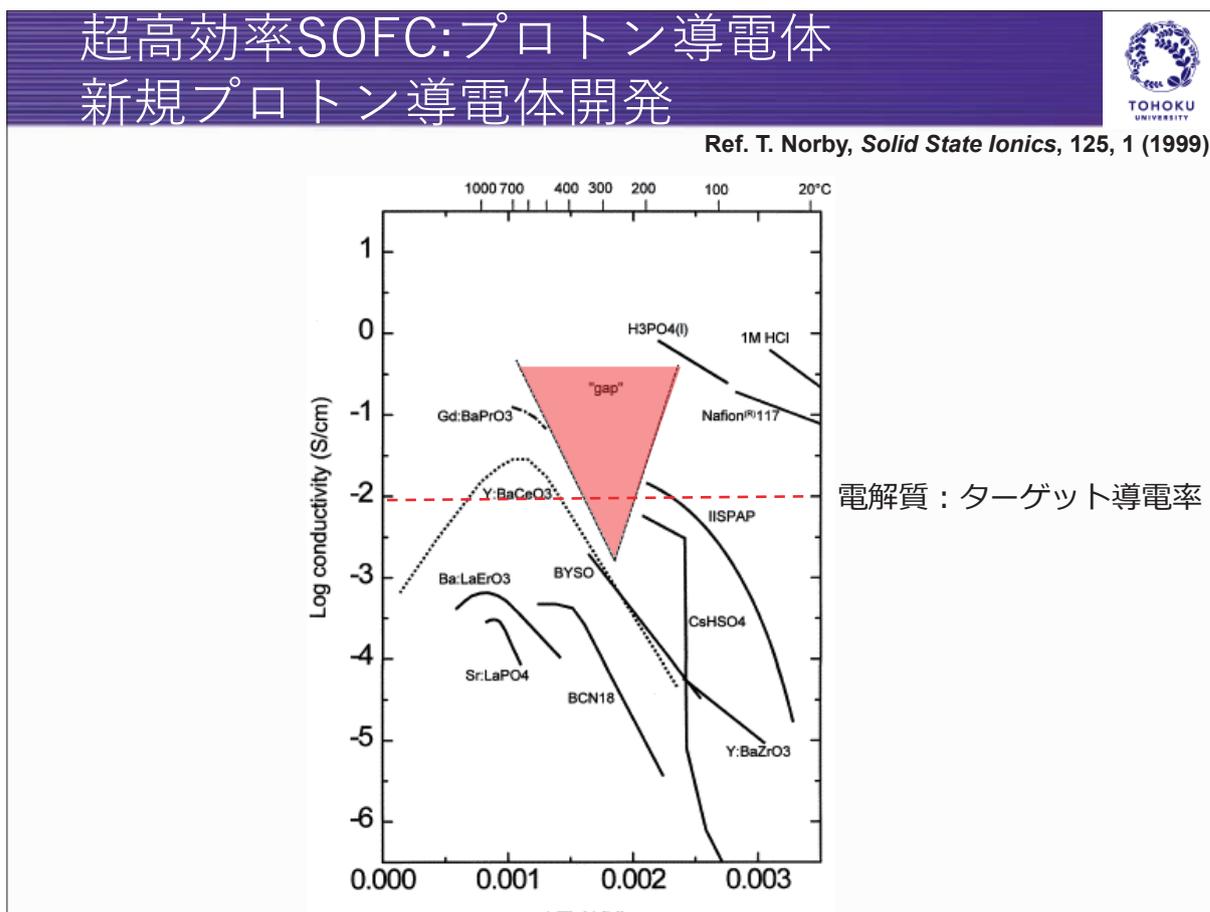


図 4-4-7

図 4-4-7 には電解質の導電率を示す。導電率としては、大体 10^{-2} S/cm ぐらい必要。これ以下では、電解質として使いづらい。この図の赤で示した領域が必要だ。しかしこのあたりの領域というのは、昔から材料がないと言われていたところであり、ここの材料開発をやる必要がある。

次に高耐久性・ロバスト化というところでは、図 4-4-8 に示すようなメタルサポートという技術がある。

車に使うような燃料電池、そして急速起動ができるような高温型の燃料電池というものが考えられている。残念ながら今日本には、メタルサポート型のプレーヤーがいない。日本はセラミック型が非常に強いという特徴があるが、外国でこのような例が出てきた。日本でもメタルサポートのような急速起動で耐久性のある SOFC をやるようなところが育っていくべきである。

発電部門での一次エネルギー消費削減というのはある程度方向性が定まっている。しかし、一次エネルギーのうち、3割、4割ぐらいは原料として使われている。再生可能エネルギーの余剰電力と高温廃熱が利用できれば、電力投入量を減らして電解、燃料製造ができる。燃料電池技術の応用として、いわゆる Power to Gas である高温水蒸気電解ができる。将来的なカーボンフリーのエネルギーシステムという点では、原料として使われている一次エネルギーの代替方法についても考慮する必要がある。

メタルサポートセル



Ceres power(英国)

- メタル・サポート：ステンレス基板の上にセル作製する技術が特徴、低コスト、ロバスト化
1kW Class micro CHP を開発中。
- 初期性能：発電効率 > 50% (LHV)
- ホンダと家庭用FCの共同研究
- 日産UKの電気自動車用レンジエクステンダーとして実証試験
- 日本にはメタルサポートのプレイヤーがない。セラミックサポートの技術に長じているが、次世代型の一つとしてプレイヤーを育てる必要あり？





Ref. Fuel Cell Seminar & Energy Exposition 2015; Proceedings of 12th European SOFC & SOE Forum 2016 A0303

図 4-4-8

【質疑応答】

Q：エネファームの総合効率は 95 %。これは電気と熱の利用効率だけでいうと達成されているということか。

A：達成済みである。廃熱からでたお湯を全部無駄なく消費したという前提である。逆に言うと、お湯を全部使い切れる量しか発電しないという条件になる。

電気効率で 80 %とか高い効率を出せれば、廃熱消費に左右されず発電でき、もっと望ましく使いやすい。

Q：そこで、ブレークスルーとしてプロトン伝導体だということか。

A：そうだ。そういうもので、新しい燃料電池ができればよい。

Q：今どうしても電気側の高効率化というほうに焦点が向きつつあるが、やはり熱の有効利用とか、熱の融通とか、そういうことも考えないといけないのではないか。これは SOFC にかかわらず。その辺はどう考えるか。

A：そう考える。熱のところは、技術的に運ぶこと、必要なところに持っていくことはできる。しかし距離が離れてしまうと、コストがかかり過ぎる。これは問題である。熱という、特に高温ではない熱は余り品位が高くないというエネルギーであり、これを高コストな状態で運ぶことは経済性の観点から難しい。これに対する明確なソリューションへは、回答を持ち合わせていない。

Q：日産の例で車に SOFC というものがあつた。これは何 °C で使うのか。700、800 °C か。

A：これは、もう少し低い温度で、600℃ぐらいだろう。この車はEVベースで、EVで走っているときに、足りなくなったら燃料電池をオンにしていくという使い方。だから急激に出力を出すことは基本的にはない。起動に関しては、ロバスト性能はメタルサポート担保しているので、普通の定置型燃料電池に比べれば、短時間起動できるはず。1時間以内、本当は数分で上げたいという要望はある。

Q：PEMではなく、SOFCを使うということは、PEMではまだ出力が足りていないということか。

A：いいえ。出力は足りている。より効率を上げるためにSOFCを使う。

Q：電気に変えるときの理論効率は、ポリマーでいう天井温度だろうか、エントロピーとエンタルピーの差。原理的な理論効率はどこまでいくのか。

A：燃料が水素の場合、室温側だと理論効率は90%を超える。
燃料と温度が決まれば理論効率は一意に決まる。例えば25℃で水素の場合、エンタルピーが-242 kJ/mol、ギブスエネルギーが-229 kJ/molなので94.6%となる。最大の実効率については80%は、あり得る。しかし、感覚的だが、90%というのはハードルが高い。

Q：室温での高い実効率を阻んでいるものは何か。理論効率に到達していない、最も大きな原因は何か。

A：過電圧。理論効率は燃料だけで決まってくるようなもので、速度論的な話は全く入っていない。反応による損失が大きい。

Q：分子論的にいうとバリア。それを実現させていないものは何か。

A：過電圧としていろいろある。特に低温で効率が下がるのは、電極の例えば酸素の還元反応とかイオン電子反応が、低温では起きづらくなっていく。そのために、どうしても室温近くで反応を起こすために、いまだに白金触媒が必要。白金代替の触媒というのが見つからない。白金ベースでできるだけ量を減らす低白金と、そういう形でやられている理由は、この問題のため。

Q：電気化学と等価交換が起こって、同じことが問題になっていると言っている。しかし、酸素はエントロピーを自分で吹き込んでいるから、水を分解するよりもすごく有利と理解していた。本当にオーバーポテンシャルだけならば、余り材料を変えても見込みがないという結論になるが。

A：過電圧は触媒材料を変えることで変わると思う。

4.5 蓄電デバイス (1) 高入出力・安全な分散型蓄電器を酸化物系・全固体型で目指す

一杉 太郎 (東京工業大学)

最初に、本発表で述べたいことをまとめる。

ここでは、開発が進んでいる全固体リチウム電池を中心として話を進めたい。

酸化物型全固体リチウム電池の実用化・高性能化に向けて取り組むべきことを図 4-5-1 に示す。

まとめ(=アウトライン)

- ① 何を開拓せねばならないか: 現状認識
 1. 高速イオン伝導体開発
 2. 界面制御: 粒界、固体電解質/電極
 3. 大量生産プロセス開発
- ② 提案1「イオン移動の動的制御」
提案2「低温(室温-200°C)における反応物理化学」
- ③ 進め方
 1. 裾野を広げる: 固体物理コミュニティを取り込む
 2. 実験室の産業革命
全自動合成システムによる新物質探索
(ロボット・人工知能技術を最大限活用)
 3. Materials Informatics活用

図 4-5-1

酸化物全固体電池の開発要素は大まかに三つに分類できる。

一つ目は高速なりチウムイオン伝導体の開発だ。全固体リチウム電池の核となる部材であり、新材料開発が切望されている。

二つ目は界面制御である。これは「固体電解質同士の粒界」、あるいは、「固体電解質と電極が形成する界面」を制御し、イオンが界面をまたぐ際の抵抗をいかに小さくするかということである。

三つ目が、大量生産プロセスの開発である。

今回は、一つ目と二つ目を議論したい。

全固体リチウム電池を理解し、上記一つ目と二つ目を実現するためにどのような研究が必要であろうか。これには三つの提案がある。

第一は、イオンの移動を自在に制御する手法である。特に電場が印加された状態でのイオンの移動は、サイエンスとしても未開拓な領域である。

第二に、低温、例えば室温や 200 °C における化学が、これからますます重要になってくると考えている。この研究には、エントロピーを考慮に入れた物質開発、プロセス開発という要素も含まれる。

研究の進め方については、世界的に非常に強い、我が国の固体物理コミュニティとの協奏を提案する。そうすれば、この 2 つのことは達成できるだろう。

そしてもう一つ、第三に、「AI/Robot-driven Materials Research」の推進を提案する。例えば我々の実験方法、実験の進め方は、もう何十年も変わっていない。生産年齢人口が減少し、研究開発の担い手が不足していく可能性が高く、生産性をより向上するには、実験室における産業革命を起こさねばならないという意識で研究を進めている。幾つかアイデアを紹介したい。

マテリアルズインフォマティクスも進め方としては非常に重要だが、JST 内外ですでに十分議論されているので、今回はスキップする。

それでは、詳細を述べていく。

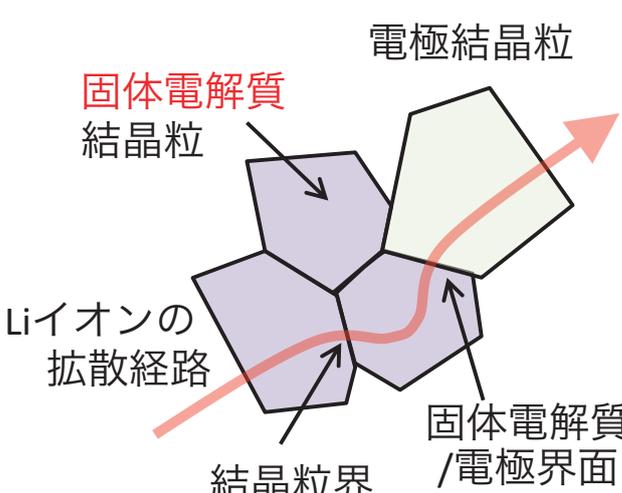
まず、全固体電池の実現に向けた研究項目の整理である。

図 4-5-2 にアウトラインを示す。

全固体リチウム電池は正極、固体電解質、そして負極から構成されている。

この正極-負極間を、リチウムイオンが固体電解質を通過して行き来する。非常にシンプルである。しかし、全固体リチウム電池内のイオンの挙動を理解することは現状難しい。

全固体電池開発の三本柱



1. 固体電解質
のイオン伝導率向上
(Li,La)TiO₃,
Li₇La₃Zr₂O₁₂: ~10⁻⁴ (S/cm)

2. 界面制御:
• 固体電解質 粒界
• 固体電解質/電極

3. 製造プロセス
高田 電気化学 85 (2017) 597
辰巳砂, 作田, 林 電気化学85 (2017) 586
菅野 電気化学 85 (2017) 591

全固体電池は **日本人の特質** にマッチ:
高度なすり合わせ技術が重要

図 4-5-2

全固体電池内部におけるイオンの通り道を拡大したものを、図 4-5-2 に示す。

ここでは充電過程を考える。リチウムイオンは正極を出て、固体電解質中を通過して負極に向かう。このとき、「固体電解質の結晶粒が形成する粒界」を必ずまたぐ。そして最後に負極結晶に入っていくときに、もう一つの界面、すなわち、「固体電解質と電極が形成する界面」をイオンはまたがねばならない。

これらイオンの通り道において、いかに高速にイオンを動かすのか、つまり、いかにイオン伝導率を向上するのかという点が開発要素となる。

高性能化に向けた課題は大まかに三つに分類できる。

一つ目は固体電解質のイオン伝導率向上である。現在、酸化物系では室温で 10^{-4} S/cm 台が精一杯で、硫化物系電解質の値 (10^{-2} S/cm 程度) に比べると小さい。そこで、酸化物においては 10^{-2} S/cm 台を目指して材料開発する必要がある。この値を示す酸化物系固体電解質が見つければ、非常に高性能な電池ができる。

二つ目の界面制御では、イオンが界面をまたぐ、つまり横切る時の抵抗 (界面抵抗) が高いことが大きな問題である。充電するときも放電するときも、この界面抵抗が高いとエネルギーのロスにつながるため、粒界界面、および固体電解質-電極界面における抵抗を下げることが非常に重要である。これにより、極めて短時間で充電可能な全固体電池が実現する。

全固体電池は前述の部材 (正極、負極、固体電解質) を高度に組み合わせる必要がある。したがって、高性能化に向けて技術のすり合わせが極めて重要である。界面構造やイオン伝導体のつくり込みなど、日本人の特質に非常にマッチしたデバイスだと考えている。

提案1: イオン移動の 動的制御技術・科学

- **外場(電場)によるイオン移動(駆動)**
 - 電池、触媒、アクチュエータ、生体材料, センサー
 - 交差相関(電場とイオン), 電位差と化学ポテンシャル
- **計算もチャレンジング**
 - 電場下、時間・距離スケールという条件
 - ミクロ・マクロ相互橋渡し
- **オペランド計測技術**
 - 電場下、埋もれた界面、時間分解能、空間分解能
- サイエンスに立脚したプロセス開発を
 - 焼成雰囲気など

**すべて固体でできているのだから、固体物理で理解できるはず
しかし、そこが難しい! チャンスあり!**

固体物理: 原子位置が固定されている状態が大前提
電気化学: 古典的理論体系に立脚

図 4-5-3

本日のワークショップの趣旨は、「様々な分野に共通の課題」を議論することと認識している。そこで、全固体電池固有の課題から話を広げて、触媒や燃料電池等他分野も含めて取り組むべき重要課題を議論していく。

いずれも固体に関係している。

全固体電池の場合、すべて固体で構成されているので、当然、「固体物理」で理解できるだろうと思う。しかし、実際にはそうではなくて、全固体電池の動作についてはわかっていないことばかりというのが私の実感である。

理解したい課題の一つは、固体中において電場がかかったときに、イオンがどのように応答して空間的に再分布するかということである。これは非常に難しい問題で、電池、触媒、アクチュエータ、生体材料、そしてセンサーなど、さまざまな面に関わってくる。

計算でも、電場下のイオンの挙動を理解することは難しい。電場の影響を取り入れた計算自体がチャレンジングである上、イオンの応答に関わる時間と距離のスケールが、今の第一原理計算のスケールと合わない。

例えば電池ではイオンが移動するのに要する時間は秒単位、時間単位であり、第一原理計算で取り扱うことができる時間スケールよりもずいぶん長い。

また、イオンは長い距離を動くので、シミュレーションする際のセルサイズも非常に大きくとらなければならない。したがって、マイクロからマクロまでを橋渡しするシミュレーション技術を開発しなければならない。

理論的、実験的な取り扱いをさらに難しくしているのは、表面、界面の存在だ。これら要素が入ってくると、固体内で通用した周期的という制約が外れるため、シミュレーションが格段に難しくなるのが実情である。

同時に、埋もれた界面の計測技術も非常に重要で、その技術開発をしっかりと進めなければならない。オペランド計測技術の開発が必要である。

以上を通じて、量子力学にもとづく確固たる「固体電気化学」の学理構築が急務である。これは燃料電池、触媒、センサー等、広範な分野をカバーする学術分野である。

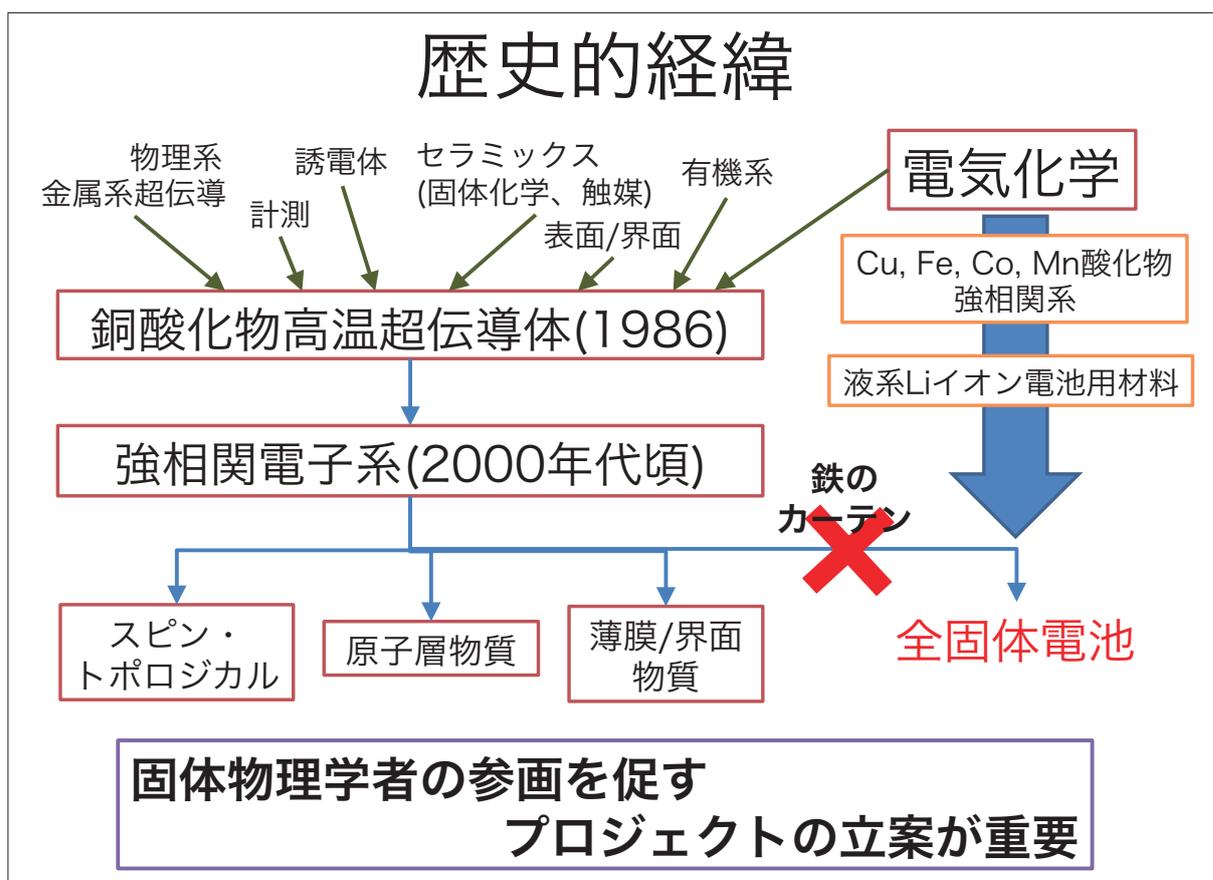


図 4-5-4

全固体電池の動作を固体物理によって、体系的に理解できていない理由を考えてみる。

それは、固体物理という半導体から出てきた非常に強固な学問体系が、「イオンの移動」を想定していないからである。固体物理は、格子、つまり原子の位置が決まっいて、それに応じて電子がどのように空間分布するかということから理論構築されている。したがって、イオンが動くと固体物理の大前提が崩れてしまって扱えなくなっているのが現状である。したがって、固体物理はその点では発展の余地がまだまだある。

一方、電気化学は、いまだ古典的な理論体系に則っており、固体物理や量子力学に則る体系をつくる必要があると思う。

そのような意味で、固体物理と電気化学を融合させ、きっちりとした固体電気化学を構築する必要がある。

その場合、固体物理の研究者は、電気化学に興味を持つかという点が課題となる。これは、電気化学と固体物理のコミュニティをどのようにして交流させるかということである。固体物理のプロの参画が必須だと考えるのは、扱っている物質系が両方で非常に近いことが挙げられる。実際には物理系と電気化学会の両方の学会を股にかけている研究者は極めて少なく、日本物理学会、応用物理学会と電気化学会をまたいで活躍する研究者が増えると良いだろう。扱っている物質系は非常に近いからである。

歴史をひもとくと、銅酸化物の高温超伝導体は 1986 年に発見され、異分野から多くの研究者が参入した (図 4-5-4)。酸化物の専門家だけではなく、金属系や有機系の研究者も。そのときに当然、電気化学分野の多くの研究者も酸化物高温超伝導研究に飛び込んだ。

分野の垣根を越えて。

その後、このコミュニティはどうなったかという、強相関電子系という概念が隆盛し、さらに最近では鉄系超伝導、スピントロニクス、トポロジカル絶縁体、原子層、薄膜表面・ヘテロ界面などの研究につながっていった。

一方、電気化学分野では脈々と鉄、コバルト、マンガンなど、まさに物性物理や応用物理学が興味の対象としている材料を扱ってきた。しかし、今、物理と電気化学の間に大きな断絶がある。

私自身はもともと物理側の研究者だったので、その断絶の理由を想像することができる。固体物理のコミュニティに一度染まった人は、電子を中心に考える。特に、電子の量子的な効果を好む。そして、固体中でイオンが動くことにアレルギーがある。

私自身も「イオンが動く世界」に入る前は、「電池はわけがわからない遠い研究領域」だと思っていた。実際、共同研究を契機として電池研究を始めた際には、「畑違いの分野にきてしまった」と途方に暮れた。しかし、だんだんと理解してきて今の状態にある。

したがって、うまいプロジェクトを立てて、「物理と電気化学間の壁を破っていく」ことが非常に重要だと思う。

固体物理の知見を入れて、新たな材料、電池用材料を探す。そして、イオンの挙動を体系化する。今、リチウムだけではなく、酸素の伝導体、あるいは、プロトンやヒドリドの伝導体も関心と呼んでおり、「拡張した固体物理」で理解して、材料設計を進めるべきである。

低エネルギー
プロセス

提案2: 低温(室温-200°C)における反応物理化学

- 低温での物質合成
 - 反応性の高い材料(プリカーサー)の取り扱い
 - 現状: 無機材料の場合、焼き固める
 - 準安定構造の活用
- 新しい材料の**鉱脈**は?
大気中で不安定な物質数 >>> 大気中で**安定**な物質

→ 界面におけるミキシング抑制
→ 活性化エネルギー制御による高速イオン伝導の実現
→ 自己修復材料、循環型材料

- イオニクス から バイオへ
 - チャレンジ: オールイオニクスデバイス
 - 電子回路不要、生体適合性

図 4-5-5

二つ目の提案は、低温での化学の開拓を行い、非平衡状態・準安定構造を使いこなすと

いうことである（図 4-5-5）。これは、低エネルギーの化学プロセスであり、環境にも優しい。従来、セラミックスなどは高温で、がんと焼いて焼結するという考え方だったので、それとは違う方向のプロセスが必要である。

低温でのプロセスの肝は、非平衡状態・準安定構造を使いこなすということである。反応性が高い材料、つまり、適切なプリカーサーを使えば、低温で化学プロセスができると考えられる。

そのようなプロセスが開発できれば、例えば前述した全固体電池界面の課題では、界面におけるミキシングの抑制につながり、急峻な界面の実現により界面抵抗の減少が期待できる。あるいは準安定構造を取り扱う技術の進展は、活性化エネルギーを制御するということにつながる。活性化エネルギーはイオン伝導の速さを左右するため、高イオン伝導材料の開発につながってくるだろう。

そして、準安定なのでリサイクルでき、循環型社会に貢献できる。つまり、準安定構造は反応性が高いため、再利用のチャンスが広がる。高温で最安定なものを作ると、その先に活用の伸びしろが無い。安定なので、何をしてもエネルギーがかかってしまう。

さらに、この研究の方向性は、材料探索の鉱脈の一つであると考えられる。

今まで、我々は最安定構造をとる物質を中心として扱ってきた。しかし、そもそも安定構造と準安定構造をとる物質の数を比較すると、後者の方が圧倒的に多い。準安定構造は使いにくいということはなく、ダイヤモンドも準安定構造であるにもかかわらず様々な応用がある。今後は取り扱う物質を非平衡状態・準安定構造に拡張することにより、材料のバリエティを飛躍的に拡大し、魅力的な機能の創出を推進することが重要である。マテリアルズインフォマティクスで準安定な物質を選び出すということも考えられる。

また、大気中で「不安定」な物質、つまり活性が高い物質のほうが世の中にたくさん存在するのは確実である。したがって、そこにチャンスがあり、様々な物質と物性が眠っている。

提案1, 2の背景: エントロピーの時代へ

$$\overset{\text{ギブズエネルギー}}{G} = \overset{\text{温度}}{H} - TS$$

従来の物理、化学、Materials infoも

時代の変革: H (エンタルピー) から S (エントロピー) へ

- 半導体デバイスの微細化: 不純物ドーパントの空間分布
- 欠陥の空間分布 スパースモデリング
- 化学反応・触媒 機械学習 Packwood and Hitosugi, Nature Comm. (2017)
- 瀬戸山さん 化学反応
- ハイエントロピー合金
今後、他の系でも5元、6元の化学、物理へ
→ 固体電解質 $\text{Li}_{9.54}\text{Si}_{1.74}\text{P}_{1.44}\text{S}_{11.7}\text{Cl}_{0.3}$

図 4-5-6

そのように考えていくと、今後、エントロピーの取り扱いが非常に重要になってくると考えている。準安定、安定は図 4-5-6 に示す式にしたがい、エンタルピーとエントロピーにより記述できる。我々の分野では、今までは、ギブズエネルギーが低いもの、つまり最安定構造を作ることが主流であったと言って良いだろう。しかし、これからエントロピーがますます重要になるのではないかと考えている。

半導体デバイスの微細化はその一例である。微細化していくと不純物の空間的な分布がデバイスの性能に大きな影響を与える。したがって、原子レベルでその分布までコントロールする必要がある。そうすると、エントロピーが非常に重要になってくると認識している(エントロピーが不純物原子の配置を決める)。

さらに、今後多元素を含む物質の取り扱いがますます重要になるだろう。たとえば、現在最高のリチウムイオン伝導率を示す硫化物は5元素からなる。今後、多元素の化合物、つまり、エントロピーが大きい物質群を扱い、機能を生み出すことが重要になるだろう。元素数が少ない化合物は徹底的に評価され、新たな機能が見出されなくなると予測しているので、自然と多元素化合物に向かわざるを得ないだろう。

次に研究の進め方に移る(図 4-5-7)。

問題意識としては、研究者の生産性向上を目指し、実験のやり方自体を変えようと考えている。ポイントは人工知能とロボットを活用することである(AI/Robot-driven Materials Research)。これにより、物質合成を自動化し、生産性の向上を図りたい。

今までの材料科学の進め方は、物質を思い浮かべ、こんな物性が出るだろうと考える。

このポイントは、まず、構造を考えて物性を考える。それはマテリアルズインフォマティクスの計算と同じだ。

しかし、構造から入らなくてもよいのではないかと考えている。酸化物固体電解質を探索することを考える。最初から 10^{-2} S/cm のイオン伝導度を持つ物質を探しなさいと指示を出せば、あとは全部自動でやってくれるシステムを今つくろうとしている。

要するに、狙った物質を作ってから物性評価をするのではなく、最初から目標とする物性を狙えば良い。「なんだかわからないけど良いものができた」、セレンディピティとはそのようなものだろう。そのために、ロボットとベイズ最適化を使っている。

ベイズ最適化を活用し、過去の成膜の履歴とその結果の物性を評価し、次の成膜条件の指示を出す。それを実際に合成してイオン伝導測定し、結果をコンピュータに報告する(図4-5-7)。このサイクルが全自動で、人間が関与することなく進むシステムを今つくっている。

そうすれば物質探索が自動化でき、24時間物質を作り続けられ、膨大な種類の試料に触れることができる。また、この成膜条件と物性値の情報は均質なデータとして、マテリアルズインフォマティクスへフィードバックすることが考えられるだろう。

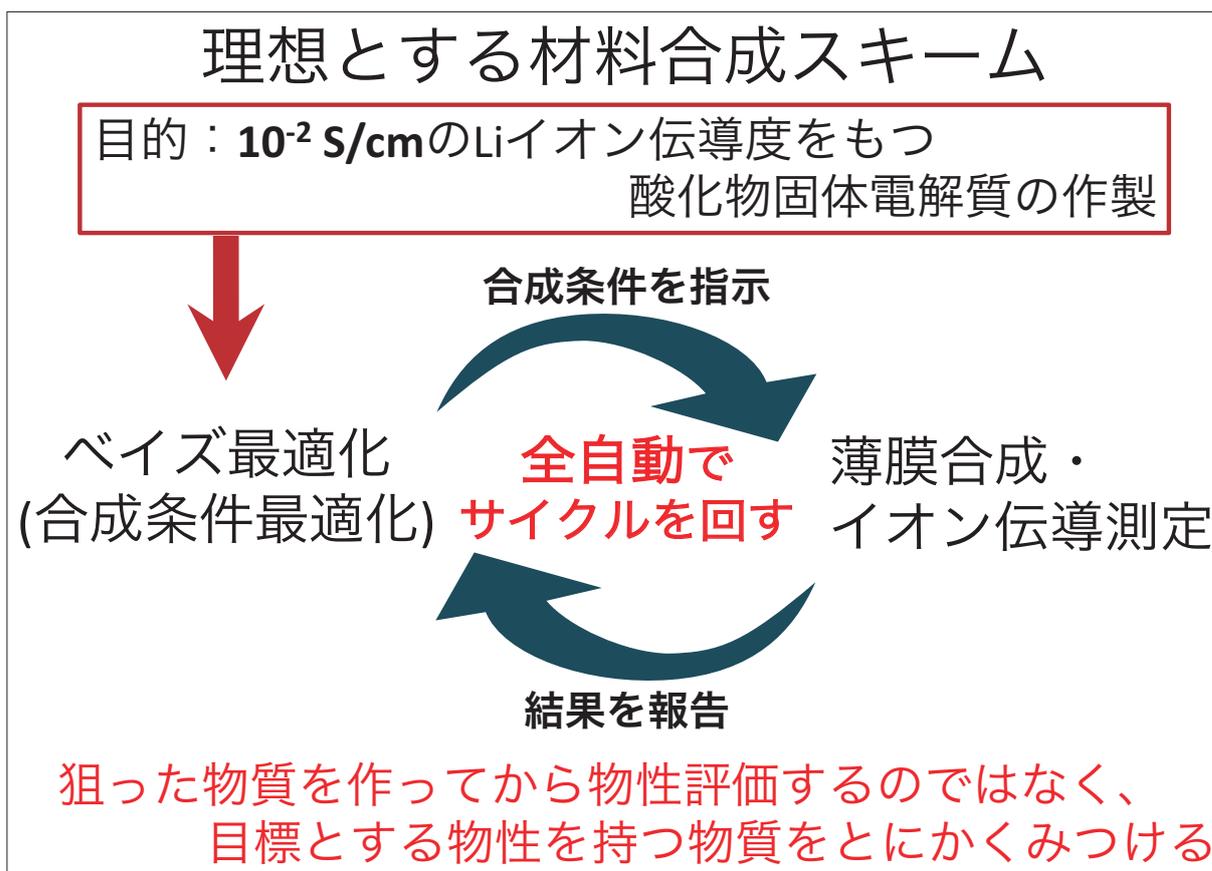


図4-5-7

今後、材料科学研究はどう進んでいくだろうか。これまでの材料研究の進め方は「家内制工業」と言って良いだろう。研究室では、「一子相伝」で教え込んで成果を出す。しかし、その学生さんが卒業したらその研究はもうできなくなる。このやり方がいつまで続くだろうか。それが問題意識だ。

近々、家内制工業から、大量生産、大量データ生産工場のような研究体制にシフトしていくと考えている。豊富な研究費を持つ国がその方向に進んだら本当に怖い。自動合成ロボットをそろえた研究機関が膨大な試料数で圧倒し、競争に勝つという、そういう時代になってくると考えている。

重要なことは、「物質探索空間を拡大する」ということである。マテリアルズインフォマティクスは、探索できる材料数が飛躍的に増大したというのが本質だ。

そこで実験のほうも探索する空間を一気に広げる。ロボットだったら24時間実験できし、研究者のアイデアもすぐに実験できる。

さらに、複数パラメーターの同時最適化は人間には絶対に真似できず、ベイズ最適化を用いると「研究者の能力を拡張」することが考えられる。

マテリアルズインフォマティクスと本システムが融合し、新物質が生まれるというのが最終的な姿である。

この方向性は教育の進め方にも絡み、教育に対して正のインパクトがあると考えている。つまり、自動化して浮いた時間を、「Creativeな仕事」に使えるようになるのである。単純な繰り返し作業は、合成勘を養うために初心者には必要であるが、何度も成膜して習熟すると、それは単純労働で時間の浪費となる。そうなれば、自動化してもさし支えない。その浮いた時間を有効活用することにより、学生さんはさらにスキルアップして研究力を高めることができる。

【質疑応答】

Q：イオンが動いたときの電子構造はどれくらいまで理解が進んでいるか。

A：固体電池の場合、硫化物系では、第一原理計算をして予測し、実際にものを作ってデータを取って、というステップが実際に踏めるようになっている。

このときの問題は、実験系で実際にものを作って評価するところに時間がかかるところだ。実験工数をたくさんかけられる所に勝つには、ここが大切だ。

Q：オペランド計測が重要だと考えており、このような系ではどんなことが難しいのか。

A：電池の場合、軽い元素を扱う難しさがある。X線ではうまくいかないこと。プロトン伝導体なども同じだが、水素やリチウムなどの軽い元素に感度が高く、空間分解能が高いような手法がなかなか無いことが難しい。

C：放射光を使うのだろう。東北大にSLiT-Jという新しい放射光設備が入る。そのターゲットはこれだ。水素、酸素、リチウムなどの軽元素の状態分析をする。かつオペランド計測。

Q：固体の中にインナーヘルムホルツ層は、固体電池の中に存在するか。

A：あると考えている。界面から1 nm程度での領域で必ず存在すると考えている。

全個体電池ではこの層の存在は重要であるが、埋もれた界面について1 nm弱の空間分解能で軽元素の分布を実験的に探ることは現状難しい。

4.6 蓄電デバイス (2) 大規模蓄電器 レドックスフロー型の革新の方向性

佐藤 縁 (産業技術総合研究所)

リチウムイオン電池や、ニッケル水素電池などと同じように、レドックスフロー電池は二次電池の1つである。図4-6-1に概要を示す。

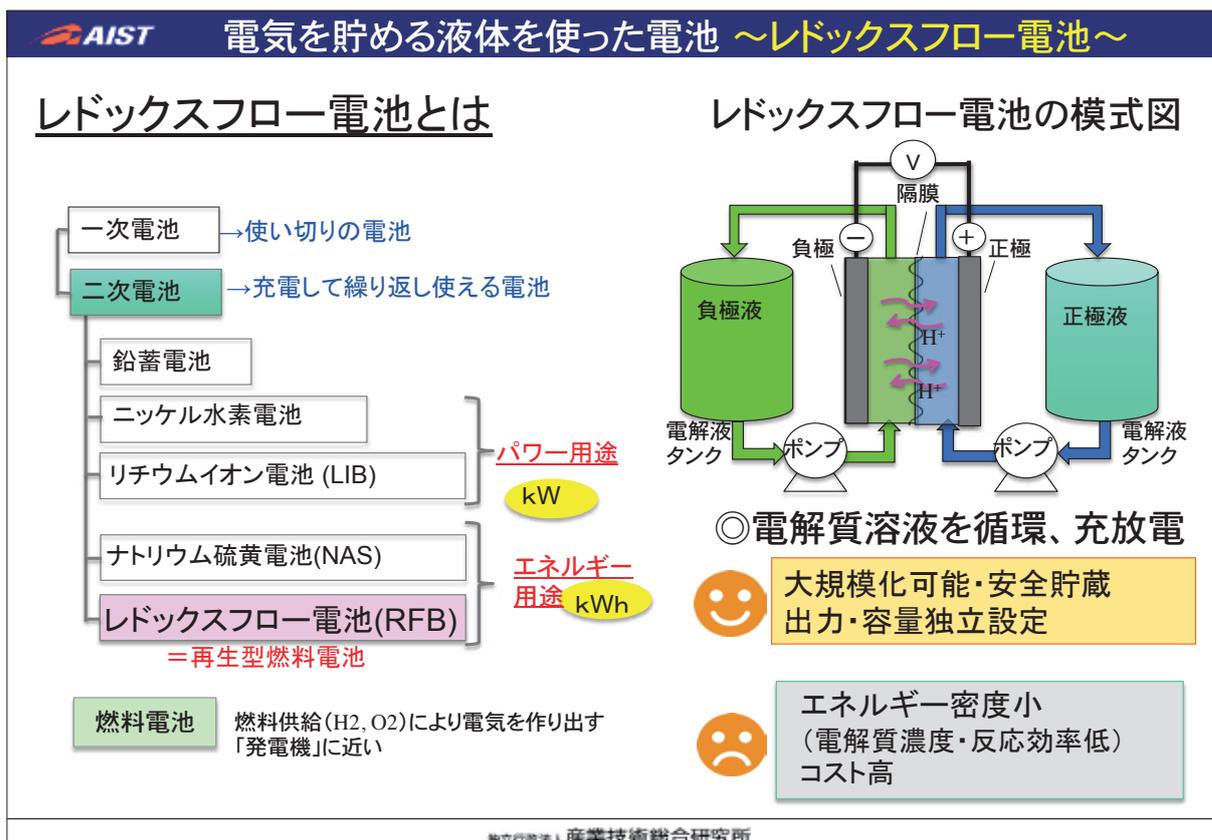


図4-6-1

原理はシンプルである。図4-6-1右側に示すように、正極液および負極液活物質を入れたタンクからポンプで正極および負極にそれぞれ循環させ、電極で反応させて電気を取り出すものである。充電は放電とは逆に、電気(エネルギー)を正負極それぞれの電解液の酸化還元の数値を変えて貯めるといったものである。したがってレドックスフロー電池(RFB)では、タンクの容量と電極の面積(セルスタック数)により出力と容量を自由に設計できる。エネルギー密度は低く、コストも意外に安くないことは今後の課題である。

AIST **大規模、大容量蓄電池**

北海道電力(株) 南早来変電所に建設 世界最大規模のレドックスフロー電池

日経産業新聞(2015年7月16日)当時
住友電気工業(株)は北海道電力(株)の南早来変電所で進めている世界最大規模(15MW, 60MWh)のバナジウムを電解液に使うレドックスフロー電池の設置工事現場を公開。

独立行政法人 産業技術総合研究所

図 4-6-2

大型の RFB としては、国内では北海道電力(株)に住友電気工業(株)製の電池が入っている(図 4-6-2)。実証試験を行っている。15 MW、60 MWh のバナジウム系電解液のレドックスフロー電池である。

実際に昨年(2016年)見学したところ、大きな体育館のような建物であった。電解液タンク(1階部分)とセル部分(2階)が配置され、現時点で実証試験を2年間継続している。

世界の動きの代表例としては、中国の Rongke Power と米国 UET が提携し、大連発電所に建設中の大型の RFB があげられる。2020 年を完成目標にしているこの RFB は 800MWh と桁違いに大きいものであり、完成すると世界最大規模となる。

国内外の RFB に関する動向をまとめると次のようになる。

- (1) 世界最大規模の RFB の実証試験(15 MW)を、北海道電力(住友電気工業製)が行っている。
- (2) 米国、欧州、中国を中心に、RFB は大型蓄電池として世界中で研究開発が活発化している。どちらかという日本では静かな状態が続いている。
- (3) バナジウム系に代わり、新しい電解液としてチタン-マンガン系の試みが住友電気工業により論文発表されている。
- (4) RFB の論文件数が 2011 年より急速に増加している。76-94 年までは全部合わせても 80 件程度であった論文数は、現在では年間 500 件程度になっている。米国 DOE が燃料電池からフロー電池に変わってきたことも一つの理由であるし、有機系やバイオ系の研究者や、金属錯体の研究者なども新規参入し、状況が変わり、論文数が急増している。



レドックスフロー電池 特徴・強み

(1) 安全性 が高い	<ul style="list-style-type: none"> ・電解液が水溶液であるので、不燃 ・危険物不使用→発火リスクがない ・大災害時においても、発火や有毒ガス発生心配がない
(2) 長寿命 であること	<ul style="list-style-type: none"> ・充放電サイクル数は制限なし ・電解液は再使用可能
(3) 設計の自由度 が高い	<ul style="list-style-type: none"> ・出力(kW)と容量(kWh)を独立に設計可能 ・大容量化、大型化可能
(4) 運用 しやすい	<ul style="list-style-type: none"> ・設置するときの行政の許可や届け出が比較的容易 (消防法の危険物に該当しない) ・常温で作動、運転と停止が容易 ・セルの充電量の均等化などの保守が不要
(5) 運転自由度 が高い	<ul style="list-style-type: none"> ・複合運転(短周期・長周期)でも、充電状態を正確に把握 かつ安全に運転可能 ・充放電サイクルによる寿命短縮の心配は無い

独立行政法人産業技術総合研究所

図 4-6-3

RFBの特徴を示す(図4-6-3)。(i) 安全性が高い、(ii) 長寿命である、(iii) 設計の自由度が高い、(iv) 運用しやすい、(v) 運転自由度が高いなどが挙げられる。

- (i) 安全性：電解液は基本的に水溶液を用いるので、燃えることがない。危険物をつかっていないので大災害時でも発火や有毒ガス発生心配が全くない。
- (ii) 長寿命：バナジウム系を想定した場合であるが、電解液は再使用可能で、ここには寿命はない。(本日のデモ用の小型RFBシステムに使用する電解液は22年前のバナジウム溶液である。あえて古いものを電池に入れて、これできちんと動かせる。)
- (iii) 設計の自由度：タンク容量を増やすことで蓄電量が増やせる。セルスタックを増やせば入出力が大きくなる。
- (iv) 運用：消防法の危険物に該当しないことによる。届け出が比較的容易で建屋も比較的簡単に作ることができる。常温で作動し、運転と停止が容易である。
- (v) 運転自由度：複合運転でも充電状態を正確に把握できる、など多くの特徴がある。

問題点としては、コストが高いことである。図4-6-4で示すように、他の二次電池(リチウムイオン電池、NAS電池)と比較してもRFBは決して安いものではない。さらにこの電池だけエネルギー密度が低い。

エネルギー密度は、リチウムイオン電池と比べて一桁低い。寿命が20年と、長いといわれるが、コストがあまり変わらなければ導入は難しく、今ひとつ導入は進んでいない。

実際にコストの決め手は、電解液とタンクであり、これで45%となる。安価な電解液、

活物質を探すか、タンクを小さくできるようなレドックス種の開発が必須になる。

JST 低炭素社会戦略センターが RFB のコスト試算をしている。20 年以上の寿命があるが 91 円 /Wh になる。リチウムイオン電池は寿命が 6-10 年で 19 円 /Wh。これをどうみるか。もう少し安くすれば普及が進むと思われる。低コスト化に向けた電解液開発が必要。そして隔膜も実は高価である。隔膜、電極の材料の探索や、製造技術開発が必須である。

AIST			
レドックスフロー電池の課題・他の二次電池との比較			
蓄電池の種類	リチウムイオン電池	NAS電池	レドックスフロー電池
主要メーカー	GSユアサ、東芝、日立、NEC、パナソニック、MHI	日本ガイシ	住友電工
システムコスト (万円/kWh)	10~15	5	9
システム充放電効率 (%)	90	75~80	72
寿命 (サイクル)	10~15年 (3500)	15年 (4500)	20年(電解液は再使用可能) (制限なし)
エネルギー密度 (Wh/L)	200	160	10~30

独立行政法人 産業技術総合研究所

図 4-6-4

次に今後の革新の方向性として考えられることを紹介する。

ハーバード大学 Michael J.Aziz 教授が発表した、金属を使用しない自然界に存在する小さな有機分子（キノン類）を使い、再生可能であり、供給が断続的なエネルギー源からの電気を貯蔵することができるという電池である。図 4-6-5 に示す。論文は 2014 年に出ている。負極側にアンスラキノンをを使い、正極側は臭素である。今までこのような系で RFB を作るということが無かったので大変注目を浴びた。金属フリー、水溶液、有機-無機ハイブリッドの RFB である。

ハーバード大の別のグループは、2015 年に計算化学の手法を用いて、キノン類の溶解度や電位を出し、正極・負極液に用いる候補物質を探した。これはすべて出し尽くされたと思ったが、実際はいくつか試してみると合わないものもあり、確認が必要でもあることがわかる。

バイオインスパイアード（生物に学んだ）電気化学活性な有機分子を利用しているというタイトルも興味深い。欧米ではジャムなど食用になっているルバーブという植物からも

アントラキノン類は良く取れるが、これが安心材料でもあるということだ。実際には、現時点ではコスト的に難しいと考える。

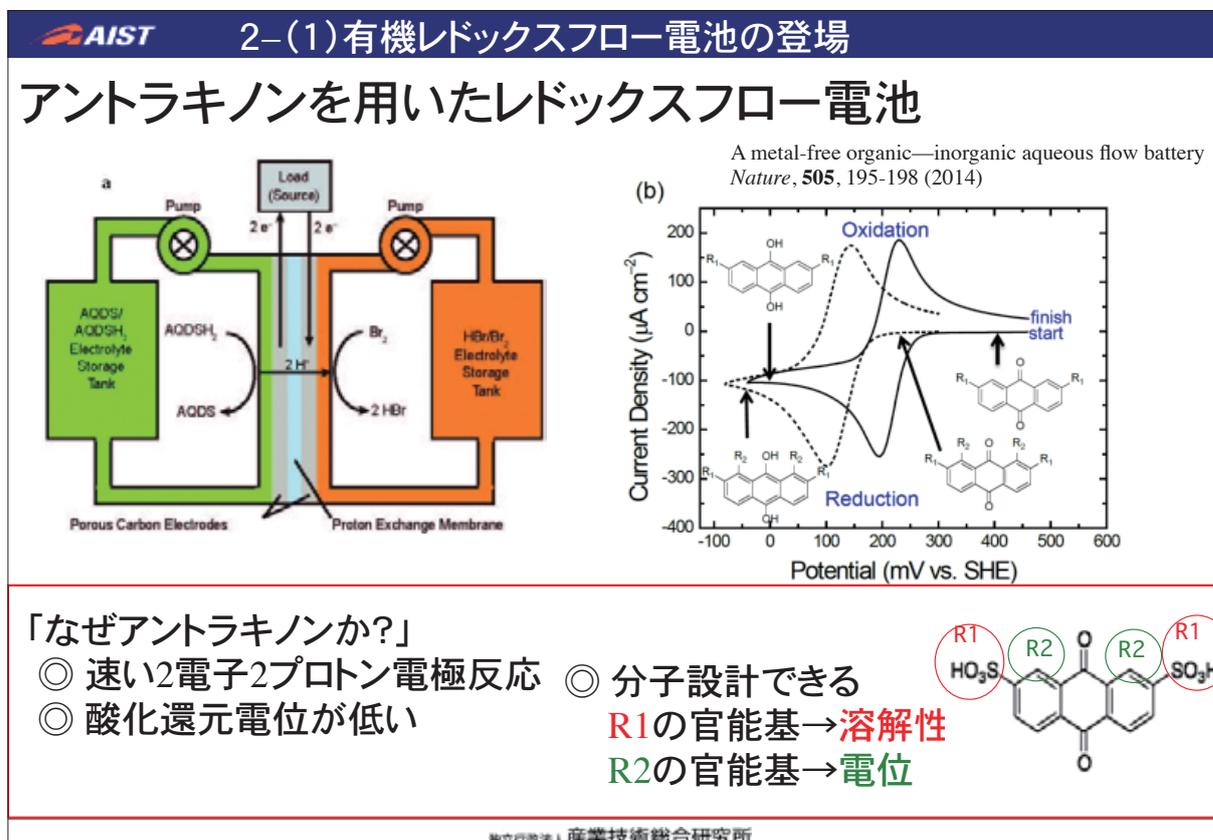


図 4-6-5

その後、ハーバード大のグループは 2015 年サイエンス誌に、より無害、非腐食性、酸は使用しない RFB を発表した。不燃性の新しい素材で、安全、安心、安価で高性能な RFB ができたと発表した。今度はアルカリ溶液を使用し、負極側がアントラキノン類、正極側に金属錯体（フェリシアン化カリウム）を用いている。

なぜ有機 RFB でキノンを使うのか。キノンは合成しやすいだけでなく、官能基を少し変化させると溶解度が高まったり、電位を変えたりすることができ、日本でも古くから行われている。このような背景で導入されるのかと思われる。

加えて、今年（2017 年）に入ってから、ドイツのイェナ大学シューベルト教授が RFB は金属から有機レドックス材料に移るという内容で *Angewandte Chemie* に総説を発表している。有機レドックス系で使われている物質を論文から拾ってまとめるといういろいろなものがあり（図 4-6-6）、特にキノン系、Tempo、メチルビオローゲンなどを使い基礎研究を進めている研究者が結構いることがわかった。

AIST 2-(1)有機レドックスフロー電池の登場						
有機レドックス種としてつかわれているもの(論文)						
水系有機レドックスフロー電池の負極・正極電解質、セル電圧、エネルギー密度等						
電解液 負極液/正極液	セル電圧 [V]	エネルギー密度 [WhL ⁻¹]	サイクル 数	電流密度 [mA cm ⁻²]	支持電解質	隔膜
AQDS/Br ²	0.96	12.7	10	500	H2SO4 HBr	Nafion 117
AQDS/BQDS	0.76	4.1	12	8	H2SO4	Nafion 112
DHAQ/Fe(CN) ₆ ^{4-/3-}	1.20	6.8	100	100	KOH	Nafion 212
MV/4-HO-TEMPO	1.25	8.4	100	60	NaCl	AME

AQDS: anthraquinone-2,7-disulfonic acid, BQDS:1,2-dihydrobenzoquinone-3,5-disulfonic acid,
 DHAQ: 2,6-dihydroxyanthraquinone,
 Fe(CN)₆^{4-/3-}: potassium ferrocyanide (K₄[Fe(CN)₆]), MV: methyl viologen, 4-HO-TEMPO: 4-
 hydroxy-2,2,6,6,-tetramethylpiperidin-1-oxyl

独立行政法人産業技術総合研究所

図 4-6-6

電極材料について紹介する。

今までは炭素繊維電極を用いてきた。これとナノカーボンを利用したり、炭素繊維電極側に溝を作ったり、炭素ペーパー電極を用いてこれと流路を組み合わせたり、電極周りの革新化や高性能化が進んでいる。

例を紹介する。セル構造の工夫で、テネシー大学の溝付きバイポーラー板を使って効率を上げている。PEFCの技術を使っており、燃料電池研究者の参画がある。RFBの効率はこれによって5倍向上したとも報告され、コストが高いと問題であっても効率が改善されればよいのではないかという提案である。

また隔膜の選択についても課題がある。膜材料は日本が強い分野の一つであるが、秘密技術が多く、障壁は高い。

どんな未来ができるか、ということで、数値は難しいので記入はしていないが、現行ががんばっても40 Wh/L、0.1 Aというような実力である。これを20倍位にしないと実用化は広がらないと考えている。

【質疑応答】

C: 過去50年間の国プロで、蓄電池に関して、日本でムーンライト計画を進めた。その中で、蓄電池で、新型電池電力貯蔵システムの開発を1980年から91年まで、NAS電池、レドックスフロー電池とあり、どちらも完成した。実用化フェーズまでいった。レドックスフロー電池は、この当時では、日本が一番技術開発が進んでいた。バナジウムレドックスフロー電池は、電総研のエネルギー部にいたOBが民間に技術移転し

て、技術的には完成した。当時の完成度は高いものだった。

C：最後に掲げた、研究開発課題は、電解質と隔膜そして電極と3つある。これは、いわゆるケミストとか材料科学者にぜひやって欲しい。しかしこういうことは伝わっていない。つまり、レドックスフロー電池の課題のことが全然共有されていない。

Q：エネルギーペイバックタイムはどれぐらいか。

A：データを持っていない。

C：今現在のリチウム電池と比べて幾らと言っているが狭い時間、区切りで見ているので良くない。このように25年も保つものは、減価償却が終わってもずっと使える。であるならば、そこをもっと、訴求できる。

C：日本では住友電気工業だけが今のところ売り出している。しかし水面下ではたくさんの企業の方がかかわっている。

Q：リチウム二次電池は日本人が作った技術であるが、今は規格を外国が決めている。RFBの規格は、ゲームのルールを日本でつくったら良いと思うが。

A：2014年の終わりから、一応、規格、標準化に多少動きは入っているが、残念ながら産総研は入り込めていない。日本は、住友電気工業だけがその委員に入っている。中国とスペインなど、多くの国が入っている中で、日本の立場が余り発揮できていない。

C：日本が世界をリードしているなら、今をおいてない。ゲームのルールをつくれれば、多分そこが一番強い。

Q：この世界だと、NAS電池はすぐに話題に出てくる。システムコストは安く、エネルギー密度も高い。そうすると、これと競争ということになる。もちろんリチウムイオン電池もあるだろう。この違いは、何か。安全性ということか。

A：そう。

Q：そのレドックスフロー、NASに対して、こう主張するとしたら、優位性は何か。

A：NAS電池は火災事故があった。実際に300℃くらいの高い温度で運転する。レドックスフロー電池は基本室温運転であり、まず火は出ない。電総研が研究をやめたころの初期の電池は液漏れがあったが、今ほとんど電解液の漏れは全然心配ない。全く安全だ。

Q：定置型蓄電池は、どんな状況か。

C：NAS電池も入ってきている。それで、NAS電池は、屋上に設置などで進めている。

Q：これに勝たないといけない。そこは、安全性を訴求するとして、他には何か。

A：安全性とコストだ。

大容量はきちんとできている。加えて最近では1kW級の小さなもので、卓上に乗るぐらいの大きさのものが概ね出来ていると聞いている。材料の開発をいろいろやっている会社だ。小型の電池は生活の場に置こうとなる。

4.7 高温超伝導材料・デバイス技術の将来シナリオと可能性

水口 佳一（首都大学東京）

本日は、超伝導分野における新物質探索という観点で、今後どのように新しい高温超伝導体が発見されていくのかについて、最近の私の研究成果を含めて私の考えを発表する。

超伝導とは、ゼロ抵抗状態や強磁場を生み出すという特徴を持つため、様々な応用が期待されている（図 4-7-1）。赤字の部分には既に実用化されているもので、小規模な磁場発生デバイス応用と言える。将来的にはもっと大規模に電流を運んだり貯蔵したりという利用が考えられるが、そのためには既存の超伝導物質よりも転移温度の高い物質を開発する必要がある。

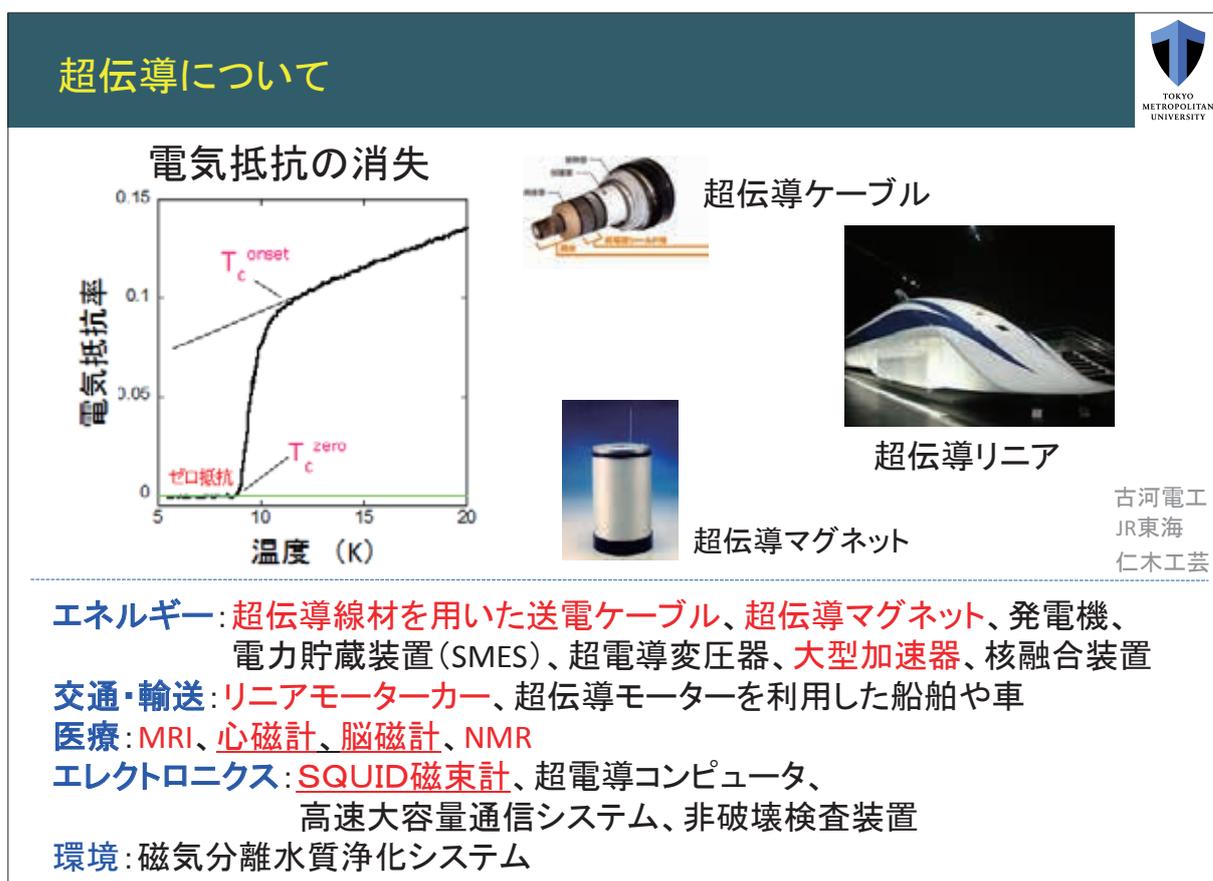


図 4-7-1

これまでの超伝導体の歴史の中で有名な発見としては、1986年の銅酸化物高温超伝導体、2008年の鉄系超伝導体の発見がよく紹介されるが、ごく最近、硫化水素で超伝導を示すことが発見され大きな話題となっている。

硫化水素を超高圧下で金属化し低温物性を測ると、これまでの転移温度の記録をはるかに凌駕し、200 K（ケルビン）を超える超伝導転移温度を示すことが観測された。室温超伝導も夢ではないのではないかとすることを想起させる発見ではないかと感じている。

転移温度の観点で、先ほど述べた大規模な利用を考えた際、革新的な超伝導の発見が求

められている。一般に、金属系の超伝導のほとんどが従来型と呼ばれており、フォノンを媒介として電子がクーパー対を作ることによって超伝導が発現するものである。例えば、 MgB_2 は日本で発見された約 40 K の転移温度を持つ従来型の超伝導であるが、銅酸化物高温超伝導などの強相関係と呼ばれる物質群には転移温度の高さで勝つことはできていない。強相関係の超伝導では基本的にはフォノンではなく、磁気揺らぎを媒介にした非従来型の超伝導発現機構が提唱されている。銅酸化物高温超伝導が発見されて以降のここ 20、30 年間は強相関係の磁気揺らぎを用いた新超伝導体の探索が行われてきた。

しかしながら、鉄系超伝導が発見された 2008 年頃からは、磁気揺らぎだけではなく、軌道の揺らぎや電荷の揺らぎなど、これまでメジャーではなかった新しいメカニズムに対して主に理論的な研究が行われるようになってきている。しかし、新物質を探索する人口がどんどん減っているため、この分野を活性化させたい。

そういう状況の中で、突如として 200 K を超える硫化水素の超伝導が発見され、さらに興味深いことにフォノンを介した従来型の超伝導ということがわかってきた。これまで従来型は高温超伝導にはならないと信じて強相関係の物質探索をしてきたわけであるが、今後は強相関係にこだわらず、様々な可能性を追求して新超伝導体を探索する時代になったのではないかと感じる。

最近特に注目されている物質群の一つとしてトポロジカル超伝導と呼ばれるものがある。2016 年にトポロジカル物性がノーベル物理学賞の受賞理由となったことをきっかけに様々なところで「トポロジカル」という言葉を耳にするようになってきている。しかしながら、日本ではまだそれほど研究者人口が多くないのが現状だが、ホットな分野として米国を中心に世界中で活発に研究がなされている。

他にも価数の揺らぎを利用したバレンススキップ超伝導というものも提案されており、そのような新規物質が高温超伝導に化けるのではないかと考えられている。

次に私の最近の研究成果を紹介したい。図 4-7-2 の右上の物質は BiS_2 系の層状構造の新しい超伝導物質である。近年、周期表の赤枠で囲った部分が電子伝導を担う物質群がホットな領域となっているが、このあたりの物質ではローンペアという孤立電子対を持つことが多く、このローンペアが電子物性に対して良い影響を及ぼすこともあれば悪い影響を及ぼすことがあり、例えばバンド計算通りの物性が出ないとか、超伝導転移温度の向上を妨げるということが最近の研究でわかってきている。

これまでの経験から、高温超伝導を目指す一つの指針が層状構造を作ることである。例えば銅酸化物高温超伝導では、層状構造の中の CuO_2 面が超伝導発現の舞台になっている。2 つの超伝導層の間に挟まれるブロック層の元素を置換することで転移温度を上昇させてきた。我々が 2012 年に発見した先ほどの BiS_2 系の層状超伝導もブロック層を持っているため、新しい高温超伝導体の発見に挑戦できるのではないかと考えている。

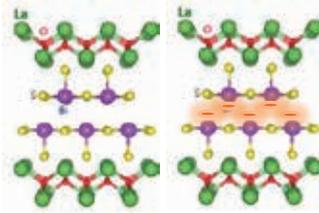
実際に我々が発見した代表的な超伝導体を図 4-7-3 に示している。転移温度としてはまだまだ高温ではなく 10 K 程度であるが、超伝導発現機構が非従来型ということが最近わかって世界的にも注目を集めている。

さらなる応用を目指した超伝導分野の展望



ローンペア元素を含む新超伝導体研究が活性化.

- ◆ トポロジカル超伝導候補物質: Bi_2Se_3 系, SnTe 系
- ◆ バレンススキップ超伝導候補物質: $\text{Pb}_{1-x}\text{Tl}_x\text{Te}$
- ◆ 新規層状超伝導体: BiS_2 系



「ローンペアは局所構造に影響を与えるため、これまで以上に結晶構造を詳細に解明しなくては、新しい超伝導機構の創出・解明につながらない」

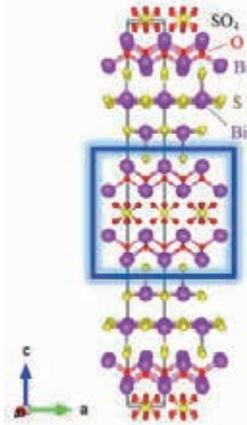
族	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	1 H																	2 He
2	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
3	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba	57-71 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra	89-103 Ac	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Nh	114 Fl	115 Mc	116 Lv	117 Ts	118 Og
			ランタノイド (57-71)	57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
			アクチノイド (89-103)	89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

図 4-7-2

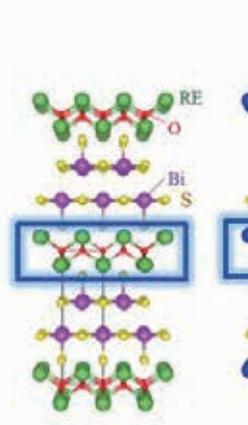
層状ビスマスカルコゲナイド (BiS_2 系) のブロック層構造



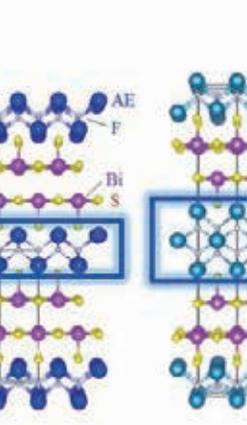
$T_c \leq 11 \text{ K}$



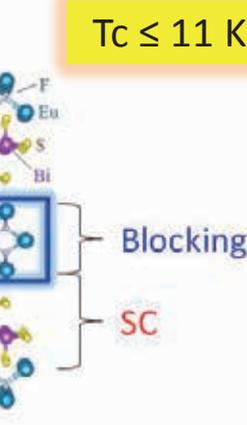
$\text{Bi}_4\text{O}_4\text{S}_3$



REOBiS_2



AEFBiS_2



$\text{Eu}_3\text{F}_4\text{Bi}_2\text{S}_4$

Blocking

SC

Y. Mizuguchi et al., PRB 2012; JPSJ 2012. J. Phys. Chem. Solids 84 (2015) 34.

- ◆ 2012年に我々が BiS_2 層を持つ超伝導体を発見し、世界中で研究されている。
- ◆ ブロック層を変えても超伝導体をデザインできる。
- ◆ 最近の実験・理論研究から、非従来型超伝導機構であることがわかってきた。

図 4-7-3

ここでのメインメッセージは、我々の超伝導物質ではローンペア（孤立電子対）が局所構造に非常に強く影響を与えているという点である。つまり、ローンペアが影響する物質開発をする際には X 線や放射光などを用いてこれまで以上にしっかりと結晶構造を調べ、構造がどのように乱れているのか、原子がどう動いているのか等を詳細に調べる必要がある。

次に、ローンペアを持つ物質開発がどう難しいかについて述べる。BiS₂ 系の超伝導体は基本的にはバンドギャップを持った半導体である母物質に電子キャリアをドーピングすることで金属化した後、超伝導を発現する。このことはバンド計算からも容易に計算可能である。しかしながら、同じような構造を持つ物質でもキャリアをドーピングしても超伝導も発現しないし、金属化もできないものもあることがわかっている。

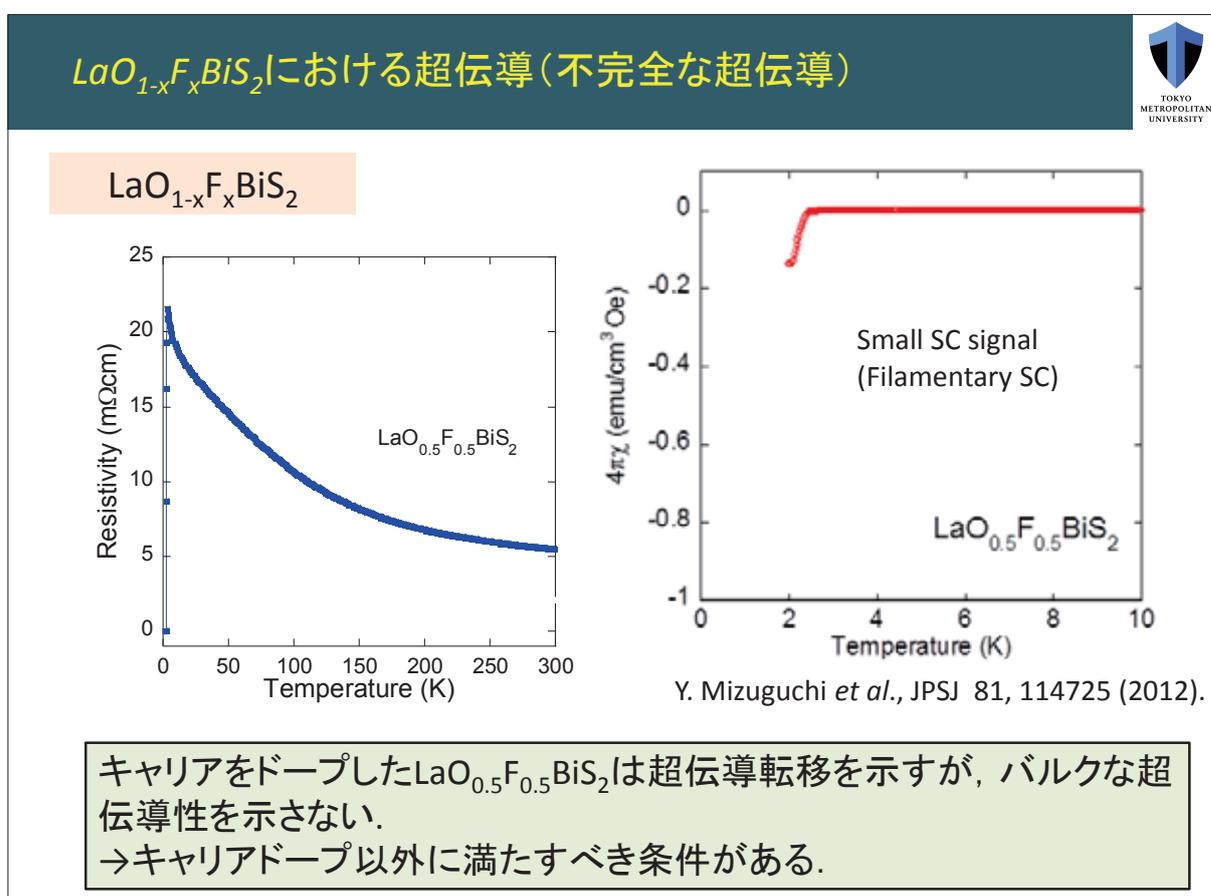


図 4-7-4

具体的には、LaO BiS₂ に電子をキャリアドーピングすると、バンド計算上はフェルミエネルギーの上にある p 軌道に電子が詰まり、金属化して超伝導化するはずである。実際には O（酸素）を F（フッ素）に置換することで電子ドーピングを行うが、F をドーピングすると電気抵抗は下がるものの低温領域で半導体的な（電子が弱く局在する）振る舞いを見せ、さらに低温にすることで超伝導転移を起こす（図 4-7-4 の左図）。この半導体的な不思議な振る舞いが磁化率の振る舞いにも現れ、通常の超伝導転移だと、転移後には -1 を超える大きな反磁性が出るが、この物質ではそこまでは到達しない（図 4-7-4 の右図）。つまり、超伝導になりかかっているがなりきっていない状態になっていることがわかる。

これを完全な超伝導体にするために、我々は圧力効果に着目した。より具体的にはブロック層における La (ランタン) を他の希土類元素 (Ce、Nd、Sm など) に置換することでイオン半径が徐々に小さくなり、物質が縮んでいく。これはあたかも圧力をかけたことと同様の効果となり、この圧力効果の影響で超伝導になることを発見した。同様の効果が超伝導層の S (硫黄) を Se (セレン) に置換しても起こることがわかった。このようにキャリア濃度は変わっていないが、イオン半径の違いによる圧力効果によって超伝導が発現することを見いだした。

種明かしをすると、超伝導が発現するかしないかにローンペアが影響している。放射光 X 線を用いて結晶構造解析をすると、元素置換による圧力が小さい領域においてはローンペアによって伝導層の結晶構造が大きく乱されることで超伝導が発現しないが、元素置換による圧力を大きくすることでその乱れが抑制され、ローンペアによる構造の乱れが抑制されたときに超伝導が発現することがわかった。このことは他の関連物質群でも共通しており、超伝導発現とローンペアによる構造の乱れの間に関連が見えてきており、どうやらローンペアによる乱れが大きい領域では、ドーブしたキャリアが局在化してしまうことで超伝導が発現していないのではないかと考えている。

以上、私の発表をまとめると、ローンペアを持つ物質はすぐに作れるものの、バンド計算と対応した物性はなかなか出ないこと、ローンペアが伝導層の電子を散乱することでドーブした電子が局在してしまっていると考えられること、これらを踏まえて今後もローンペアを持つ物質群において非従来型の超伝導体は発見され、さらにこれまで知られていない物性や超伝導発現機構が見つかるのではないかとということである。

さらに軌道や電荷の揺らぎを利用することで、もしかすると室温超伝導の発見につながるのではないかと感じている。

【質疑応答】

Q : 軌道の揺らぎや電荷の揺らぎを利用するにはどういう科学的な手法が考えられるのか。

A : 軌道の揺らぎに関しては、伝導層の結晶構造を歪ませることが考えられる。電荷の揺らぎに関しても光電子分光等で電荷の動きを見る必要があるが、いずれにしても超伝導とどう繋がるのかを理解することは難しい問題である。

Q : 化学圧力効果を赤外分光やラマン散乱でも見ているのか。

A : そこまではまだできていない。

C : 実際にはバンド計算は、一体近似で書かれている。だからこの超伝導は、多体効果が効いていると予想されるため、実験の結果を見せることが重要になると感じている。

Q : ローンペアが超伝導にポジティブに効いているということはないのか。

A : おそらく超伝導に対してローンペアはネガティブに働いている。ただし、熱電材料に関してはローンペアがポジティブに働いているという結果がある。

C : 固体化学の観点からも、Bi (ビスマス) を含む化合物には非常に変わったバンド構造が現れるということが知られており、Bi の s 軌道と酸素の p 軌道が混成して作られた反結合性軌道がもう一回 Bi の p 軌道と相互作用していることが影響しているという話がある。変わった結晶構造を持つからそのような相互作用が生じるのか、もしくは

はそういう相互作用があるから変わった結晶構造になるのか、順番はよくわかっていない。しかし **Bi**、**Pb**（鉛）、**Sn**（スズ）系の化合物にはそういうことがよく起こると言われており、そこでのローンペアとの関係を調べることは大変興味深いテーマである。

Q : **Bi** 系だとトポロジカル絶縁体との関連やスピン軌道相互作用が重要な役割を果たしているのではないかと思うが、そのあたりの考察も必要ではないか。

A : 実際にバンド計算にもスピン軌道相互作用を入れないと実験結果を再現しない。また今回の紹介した非従来型の超伝導の発現機構にもスピン軌道相互作用が関係しているのではないかと感じる。

4.8 熱電変換 低温域・温度差 100 °C以下での機能実現を目指した研究開発

末国 晃一郎 (九州大学)

最初に、熱電変換がどのようなものかについて説明する。一般的に熱電変換とは熱と電気の直接相互変換を指しており、代表的なものとしてゼーベック効果とペルチェ効果がある。ゼーベック効果を簡単に説明すると、試料の両端に温度差をつけることで電圧が発生する現象である。試料を外部の負荷につなげば、あたかも電池のように振る舞って発電が可能である。ペルチェ効果とはその真逆で、試料に電流を流すことによって端で吸熱と放熱が起こる現象である。加熱だけではなく冷却にも使えると言うことで、精密温調にも利用できる。

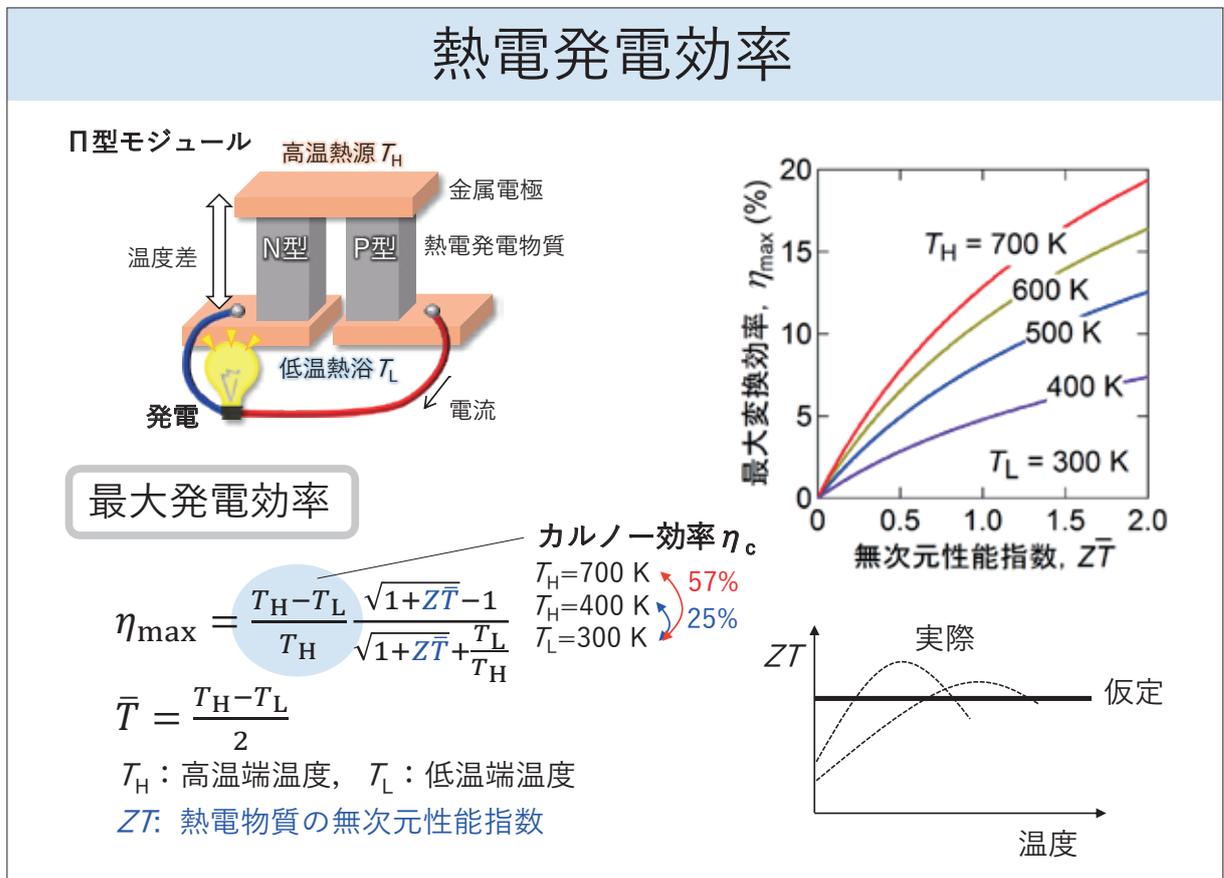


図 4-8-1

発電の方の話をする (図 4-8-1)。熱電変換物質の両端に高温熱源と低温熱浴を接触させることで有用な仕事を取り出せる熱機関を作ることができる。発電効率は、カルノー効率と材料固有の無次元性能指数 ZT を用いて表される。カルノー効率は低温熱浴を 300K として、100 °C の温度差で 25 %、400 度の温度差で 57 % である。ここで、 $ZT = 1$ とすると、温度差が 10 °C で変換効率は 5 %、400 度で 12.5 % である。ただし、ここで変換効率を求める際に ZT が温度に依らないと仮定したが、実際は図 4-8-1 の右下図のように複雑な温度依存性がある。

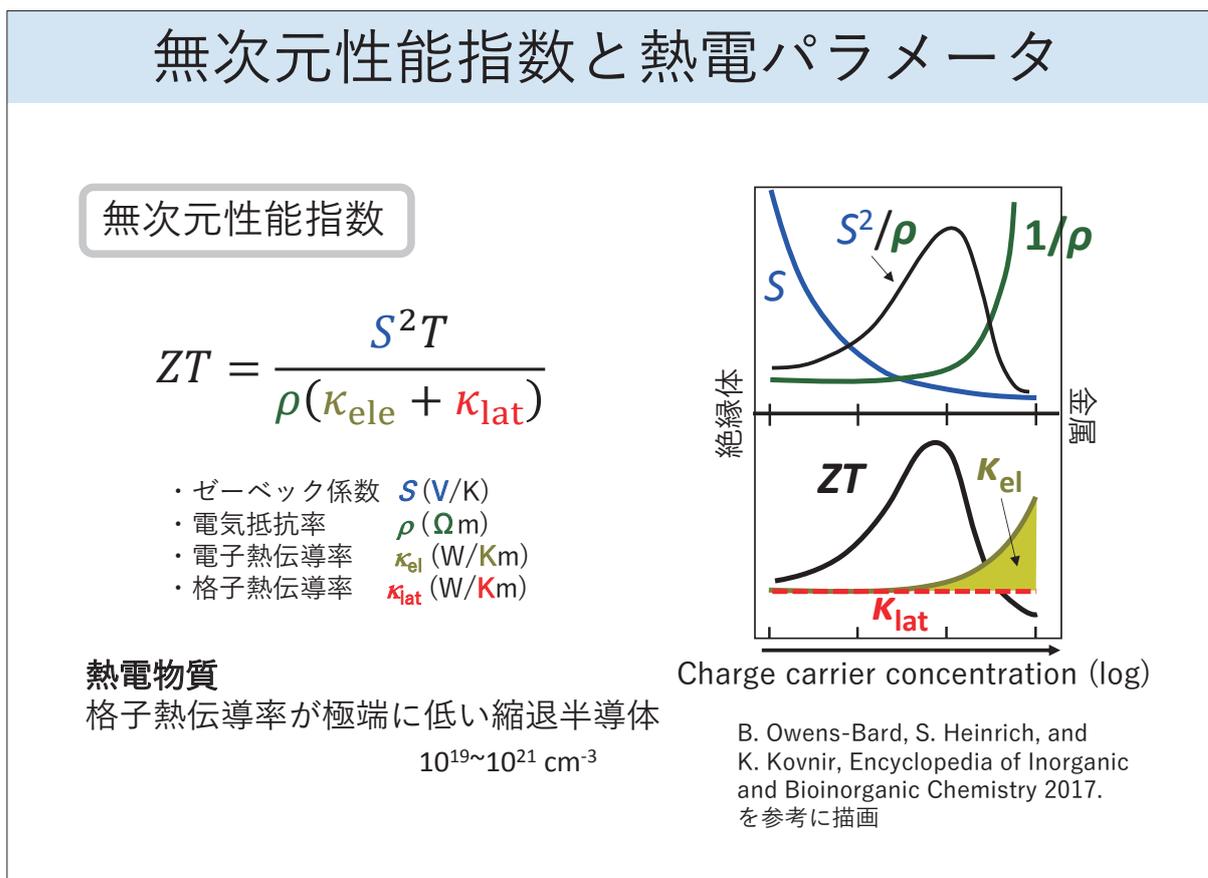


図 4-8-2

ZT は図 4-8-2 のように表され、ゼーベック係数が大きいほど、また電気抵抗率が小さいほど大きくなる。これは、図 4-8-1 の発電モジュールにおいて、起電力を大きくし内部抵抗を小さくするためである。また、ゼーベック起電力を高く維持するためには、試料両端の温度差を大きく保つ必要があり、そのために熱伝導率は低いほうがよい。

ゼーベック係数、電気抵抗率、電子熱伝導率はすべてキャリア密度の関数である。多くの物質では、ZT が最大化する最適キャリア濃度は $10^{19} \sim 10^{21}$ であり、そこにあわせる必要がある。この値は縮退半導体や半金属で実現する低い値である。そのため、熱伝導率におけるキャリアの寄与が小さく、格子の寄与が支配的である。簡単にまとめると、格子熱伝導率が低い縮退半導体や半金属が熱電物質となる。ここで、格子の熱伝導率はキャリア濃度にほとんど依存しないので独立に制御することができ、熱電物質の性能向上に直結する。

従来報告されてきた熱電材料は、熱伝導率の低減に有利な重元素を含んでいる、0.3 eV 以下の狭バンドギャップを持つ半導体がほとんどであった。これらの中で Bi-Te 系と PbTe 系の 2 つが実用化されている。Bi-Te 系は室温付近での性能が高い材料であり、KELK という日本企業が熱電発電モジュールとして実用化している。高出力モデルとして、大きさ $5\text{cm} \times 5\text{cm}$ 、温度差 $250 \text{ }^\circ\text{C}$ のときに最大出力密度 1 W/cm^2 、変換効率 7% 程度となっている。

PbTe 系はもう少し高温まで使える材料であり、放射性同位体熱電変換器での実績がある。この発電装置は、プルトニウム Pu^{238} の崩壊熱を電力に変換している。Voyager や Cassini のような惑星探査機の動力源として 3、40 年稼動し続けている。また最近では、

Curiosity/rover という火星探査機の動力源として使われている。

熱電変換材料の性能は様々な手法により高められてきた。そのさきがけは、1950年代に Ioffe が半導体に着目し、元素置換により結晶構造を乱すことで格子熱伝導率を下げて性能を高めたことである。その後、ドーピングに付加価値をつけることで性能はさらに高まった。例えばフェルミ準位近傍の電子状態密度への共鳴準位の形成や、結晶構造の制御によるバンドの縮重度の増大などである。

また、1993年には Dresselhaus により、材料を低次元化したときの量子効果を利用して熱電性能を向上させる方法が提案された。これをきっかけにナノというキーワードが熱電材料の領域に浸透することとなり、例えば結晶粒子のナノサイズ化、バルク材料中へのナノ粒子の埋め込み、階層構造制御などにより、それまで $ZT = 1$ だったものが 2.2 に上がることを示された。

熱電材料のその他の設計指針として、1995年に Slack により提案された Phonon-glass Electron-crystal がある。これは、フォノンに対してはガラスのように振る舞い、電子に対しては結晶のように振舞う物質の探索を促すもので、その後かご状熱電材料の開発に繋がった。カゴ状物質中では、電子はかご骨格を流れるのに対し、フォノンはかご内の原子のラットリングと呼ばれる大振幅振動により乱されるため、低い電気抵抗率と低い熱伝導率が共存する。最近我々は、平面配位構造でも熱伝導率を抑制するラットリングが起きることを発見した。また、イオン伝導体やローンペアを持つ物質が低い格子熱伝導率を持つことも報告されている。これらの指針を活かして、低熱伝導物質が最近相次いで発見されている。

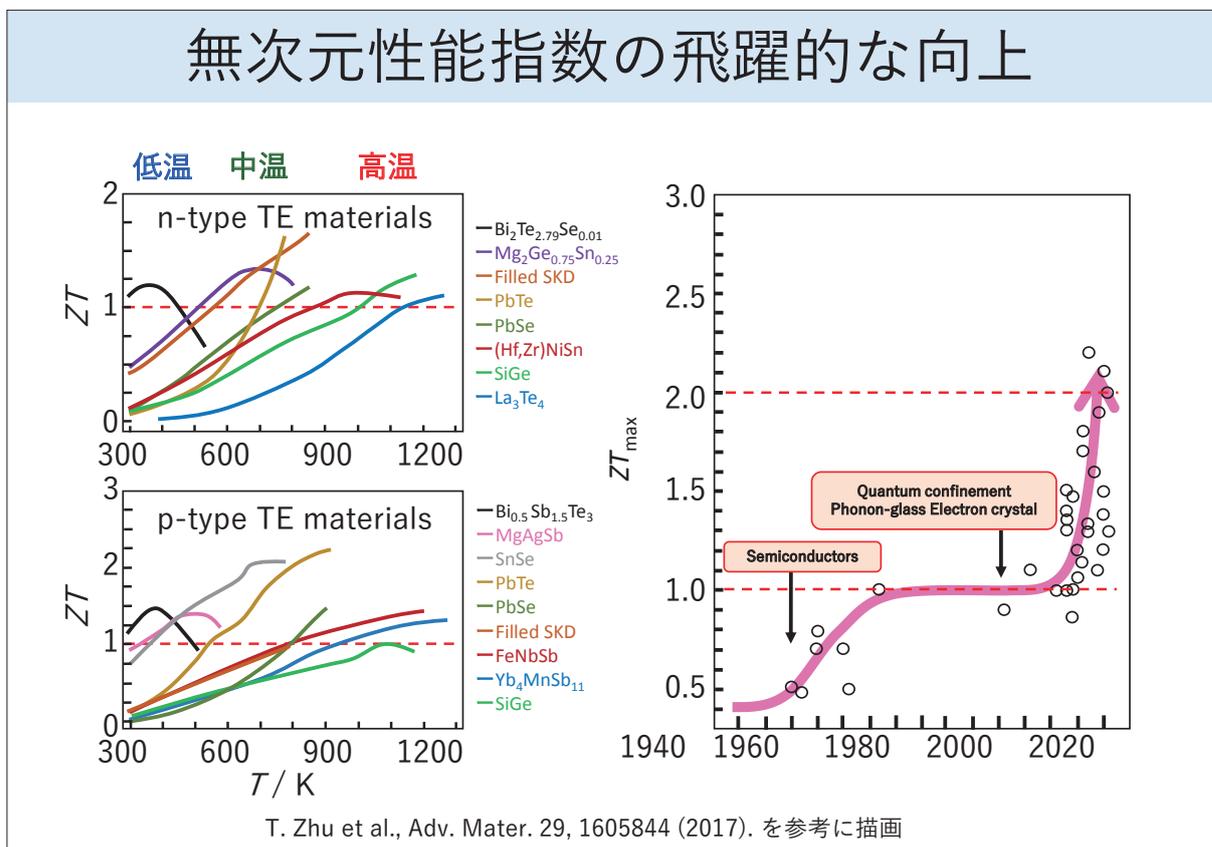


図 4-8-3

このような様々なアイデアにより、これまでは $ZT = 1$ が閾値になっていたが、2010年あたりを境にして ZT の値が急激に上がってきた (図 4-8-3 右図)。100 °C以下の低温域では依然として Bi-Te 系や Bi-Sb-Te 系の独壇場であるが、中温域 (500~600 °C) では PbTe 系を置き換えるような材料系がようやく出てきたところである (図 4-8-3 左図)。

日本においては、図 4-8-3 にはプロットされていない環境低負荷の熱電物質がいくつか発見されている。例えば、2000 年以降では、熱耐久性に非常に優れた、Na、Ca、Zn を含んだ酸化物系材料が活発に研究されてきた。また、我々は Cu と S を主成分とする硫化銅鉱物であるテトラヘドライドやコルーサイトを人工的に合成し、組成を制御することで高い性能を得ることに成功した。他にも日本のグループが Mg を多く含む材料において、700K での高い ZT を実現している。

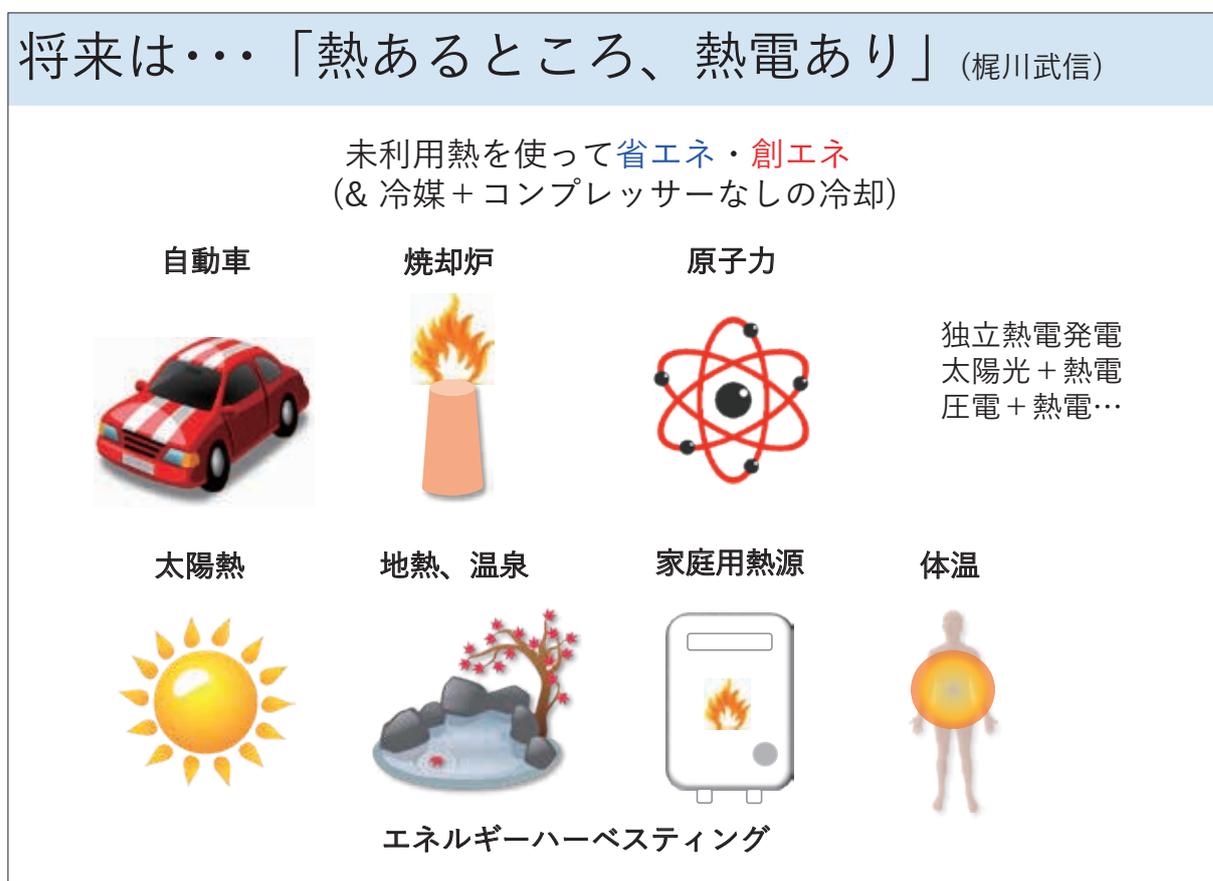


図 4-8-4

将来的には、梶川武信先生の言葉を借りると「熱あるところ、熱電あり」という世界が来ることを期待する (図 4-8-4)。熱源はたくさんあるため、未利用熱を電力として回収することで省エネだけでなく創エネにも貢献できるだろう。熱電発電を独立して使いたいが、現状では効率がまだ低いという意見がある。室温で使う場合であれば、太陽電池などと併用すればよい。つまり、発電技術をあれもこれも使う中に熱電発電を組み込めばよい。その際、他の技術の邪魔はしないように、熱電材料が低コスト、安全・安心であることが必要であると考えている。

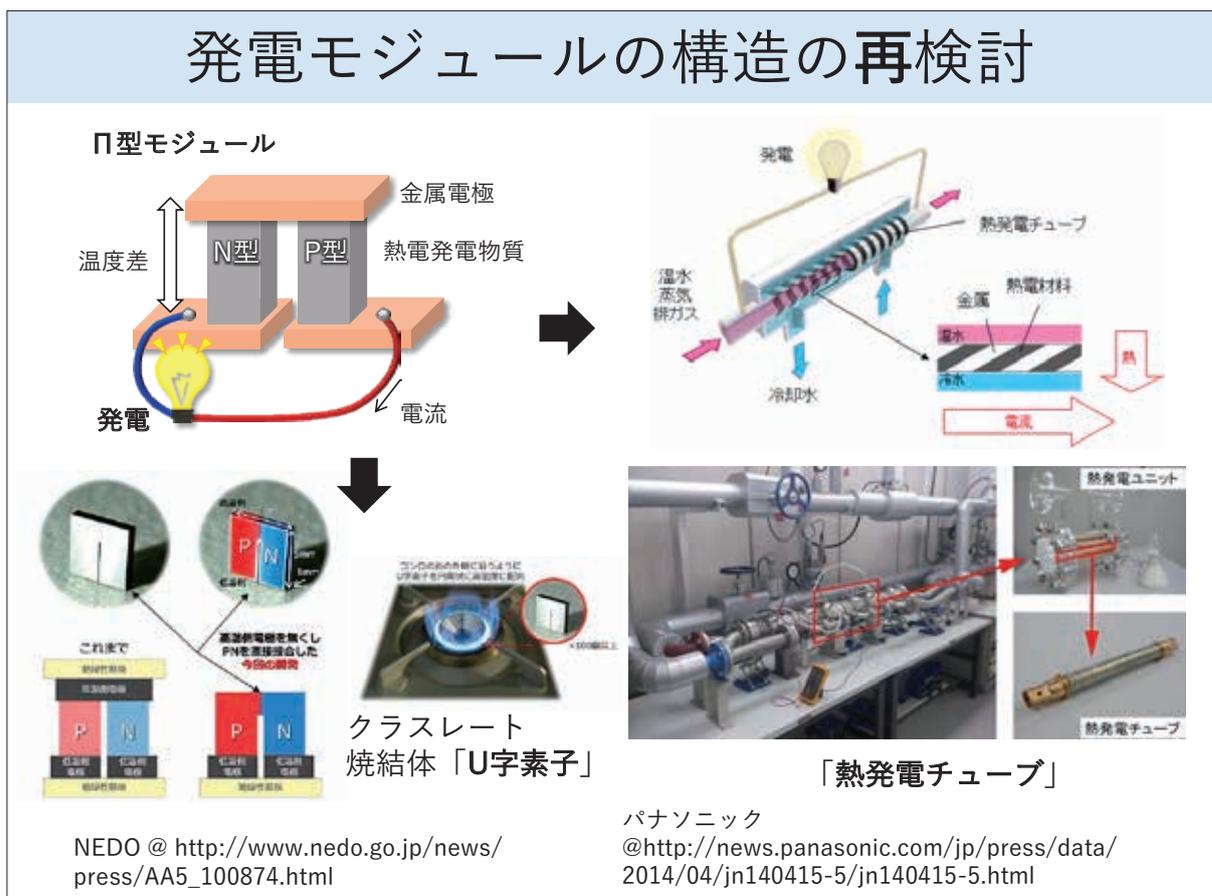


図 4-8-5

我々がこれからやるべきことについてお話する。まずは実際の使用環境に近い条件での評価が必要である。例えば、試料の両端に数百℃の温度差をつけたうえで1 A もの電流を流すという、試料にすれば過酷な条件を課したときに、どの程度耐久性があるのかを調べるのが重要である。さらに難しいところとしては、材料と金属接合、電極接合技術の検討や、パッケージングの検討なども同時に進めていくべきである。他には、一研究室レベルでは難しいが、実証実験がさらに進むことを期待する。

発電モジュールについても図 4-8-5 のように再検討が必要である。従来は n 型と p 型を直列につないだπ形をしたものがほとんどであるが、高温熱源側で電極との接合部分にどうしても負荷がかかる。これを解決するために、最近では例えば U 字型素子といって、p 型と n 型を一体焼結した素子が出てきている。あとは、パナソニックが開発した熱発電チューブというものが非常に興味深く、金属と熱電材料を傾斜状に配置することで熱を流す方向と電気を取り出す方向を直交させている。このようなモジュール構造の検討がさらにすすむことを期待する。

また、Bi-Te を超える高性能材料の開発も必要である。そのために、フォノンの効果的な散乱や電気的特性の向上をもたらすナノ構造や界面の役割の詳細な解明が必要となる。それにより、表面や界面が示す特異な物性がバルク全体で発現する材料が開発できるだろう。新しい性能向上指針の提案にはビッグデータの解析が重要であり、材料を作る立場からすると材料合成に活かせる非従来型の経験則、理論の発見／提案を期待している。

さらに、これまでの ZT 至上主義から脱却してもよいと考えている。Bi_{0.5}Sb_{1.5}Te₃ は出

力因子 (Power Factor) が大きく熱伝導率が低いという優れた材料ではあるが、例えば、出力因子だけみるとその2倍以上大きいハーフホイスラー型の材料 $\text{Ni}_{1-x}\text{Ti}_x\text{FeSb}$ がある。この材料は熱伝導率が高いため ZT は低いが、熱をどんどん流しながら発電するという条件であれば有用であると考えている。また、100 °C 以下の低温域でのエネルギーハーベストを考えるのであればモジュール体積が制限されてしまうため、熱伝導率が大きくて ZT が高い材料よりも、ZT はそこそこであっても熱伝導率が非常に小さい材料の方が同じ体積でみると出力が高い場合もある。つまり、材料の長所を活かした使い方が可能である。

また、フレキシブル、非常に安価などの特徴を持つ有機材料も報告されている。柔らかいというだけでなく、無機材料よりも高い性能を示すものもいくつか報告されており、このようなものも積極的に実用化に向けた取り組みをしていくべきではないかと考えている。

【質疑応答】

- Q：熱電材料には車の排熱とかからのニーズが高いと思うが、熱さえあれば電気を作れるとなると、例えば巨大プラントの中の光が届かないような場所のメンテナンス用センサーとして、1時間に1回とか1日に1回信号を送れば良いという状況下での利用というデバイスシステムへの応用まで広げていけば実用的になるのではないかと。熱電変換効率だけが観点ではない。
- A：まさに CREST の「微小エネルギーを利用した革新的な環境発電技術の創出」という領域ではそのあたりを目指して研究が進められている。
- C：通信系のところまで入り込むと省エネに繋がるのではないかと感じるため、是非進めていただきたい。
- Q：熱電変換はおそらく異分野連携とか学際研究が一番進む分野、特に熱工学の連携が重要ではないかと感じている。例えば、1方向に熱移動させるには、ナノテクやフォノンエンジニアリングが必要で、かなり制御技術の基盤的なものができつつあるのではないかと。電子系とフォノン系を独立に制御することも可能になるのではないかとと思うが、そのあたりの見込みはどのようなものか。
- A：実際に熱電学会には伝熱学会の研究者も多数おり、リンクして進めている。現状ではフォノンエンジニアリング研究ではシリコンに穴を空けて熱伝導率を制御して、比較的クリーンな材料を使っている。しかし我々は結晶構造が乱れた系を対象としている。少し方向性が異なるが、今後うまくリンクすることを期待している。

4.9 パワーエレクトロニクス 低損失・低コスト型新材料の開発方向性

金子 健太郎 (京都大学、(株) FLOSFIA)

私は、博士課程 (D1) のときにベンチャーの FLOSFIA (当時は ROCA という名称) を現社長の人羅とともに作った。このときは、JST の京都知的クラスター事業を通じて、藤田先生と人羅社長 (当時は ALGAN 社の社長) との活発な交流があり、それが FLOSFIA を生む原動力になった。D1 の学生が会社つくりたいと言ったときに、普通の教授なら、「そんなもんだめだ」と言うところを、藤田先生が許してくれたのが一番大きいと思っている。会社の運営を行いながら、世界で初めてアルファ酸化ガリウム (α -Ga₂O₃) の博士論文で学位を取得し、藤田研の助教になった。

次に会社の説明をする。私が D1 のとき (2011 年) に会社を設立した。最初は厳しい状態だったが、東大のエッジキャピタル、三菱重工、ブラザー工業、安川電機などに出資していただき、資本金が約 15 億円になった。今は、かなり注目されているため、最低投資額 3 億円と強気の設定をしている。現 CTO の四戸は元は東芝のパワー半導体のトップであり、従業員数は 30 名である。最初のよちよち歩きの会社から、図 4-9-1 に示すように、NEDO や JST の A-STEP などのファンディングをもらいながら、技術を蓄えて成長してきた。

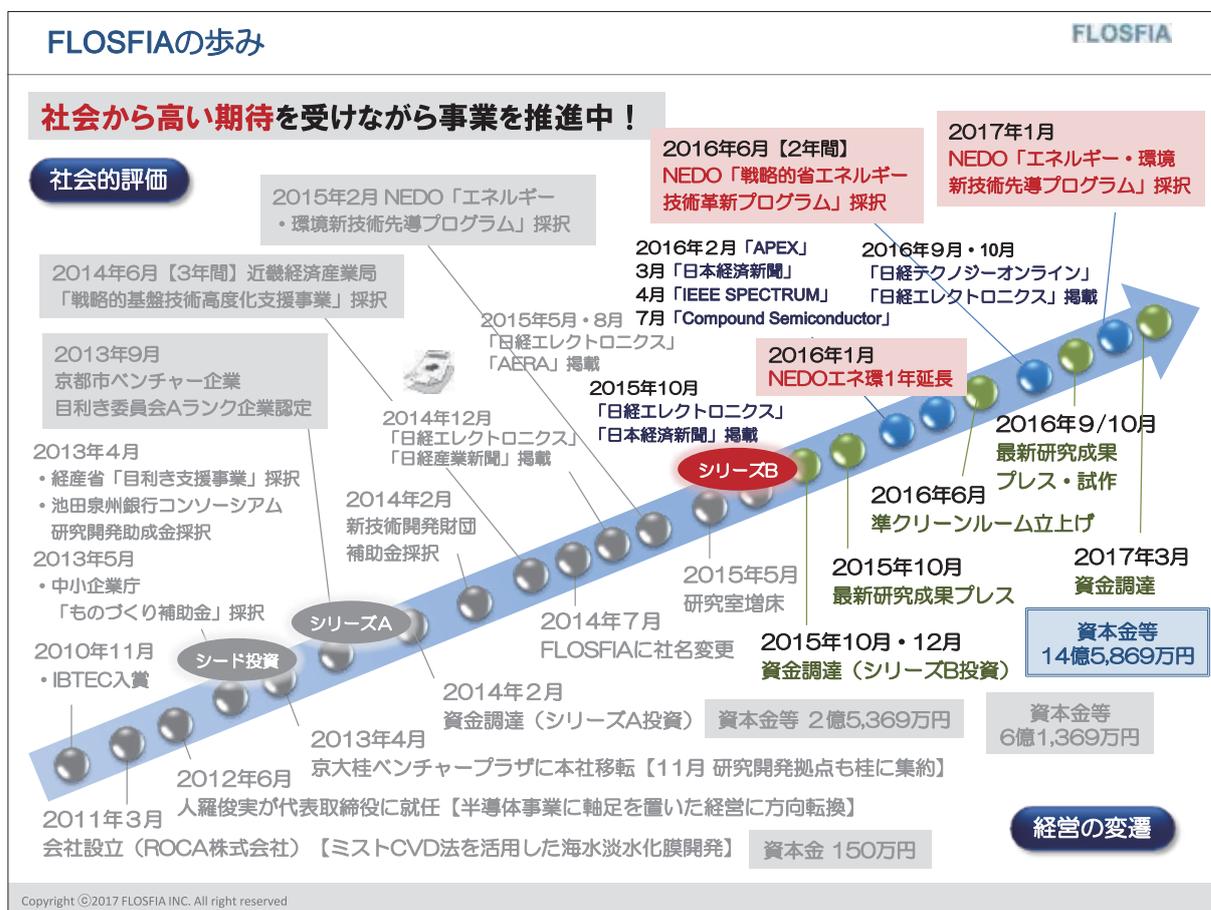


図 4-9-1

藤田研究室の紹介もしておく。藤田研のポリシーとして、グリーンマテリアルとグリーンテクノロジー、つまり安全安価な材料を使うことがある。究極の安全な材料は酸化物であろう。なぜなら、空気中にほっておいても大丈夫であり、大抵の酸化物は食べても安全である。しかも、半導体として非常に優秀で多様性に富む材料である。さらに、それらの半導体材料をクリーンで省エネルギーかつ環境負荷の少ない方法で結晶成長できる。その一つの方法に我々が独自に編み出したミスト CVD がある。ミスト CVD はこれから紹介する酸化ガリウムのキーテクノロジーであり、これがないとアルファ型がつかれなかった。準安定相や作製が困難な酸化物をつくれるのがミスト CVD である。

私が入る前も酸化ガリウムの研究を少しやっていたが、ほとんどの人がやっていたのは安定相であるベータ型であった。私はあえてアルファ型を選んだ。アルファ型は親しみのある結晶構造をしている。一方、ベータ型は安定相で作りやすいが、ベータガリア構造というベータ酸化ガリウム ($\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$) だけがとる特殊な構造である。このため、他の半導体と組み合わせるバンドギャップエンジニアリングができないことになり、半導体としての拡張性がゼロである。アルファ型に注目したのは、図 4-9-2 に示すように、結晶構造がサファイアやインジウムオキサイド (In_2O_3) などと全く同じ構造なので拡張性があり、バンドギャップエンジニアリングができるためである。

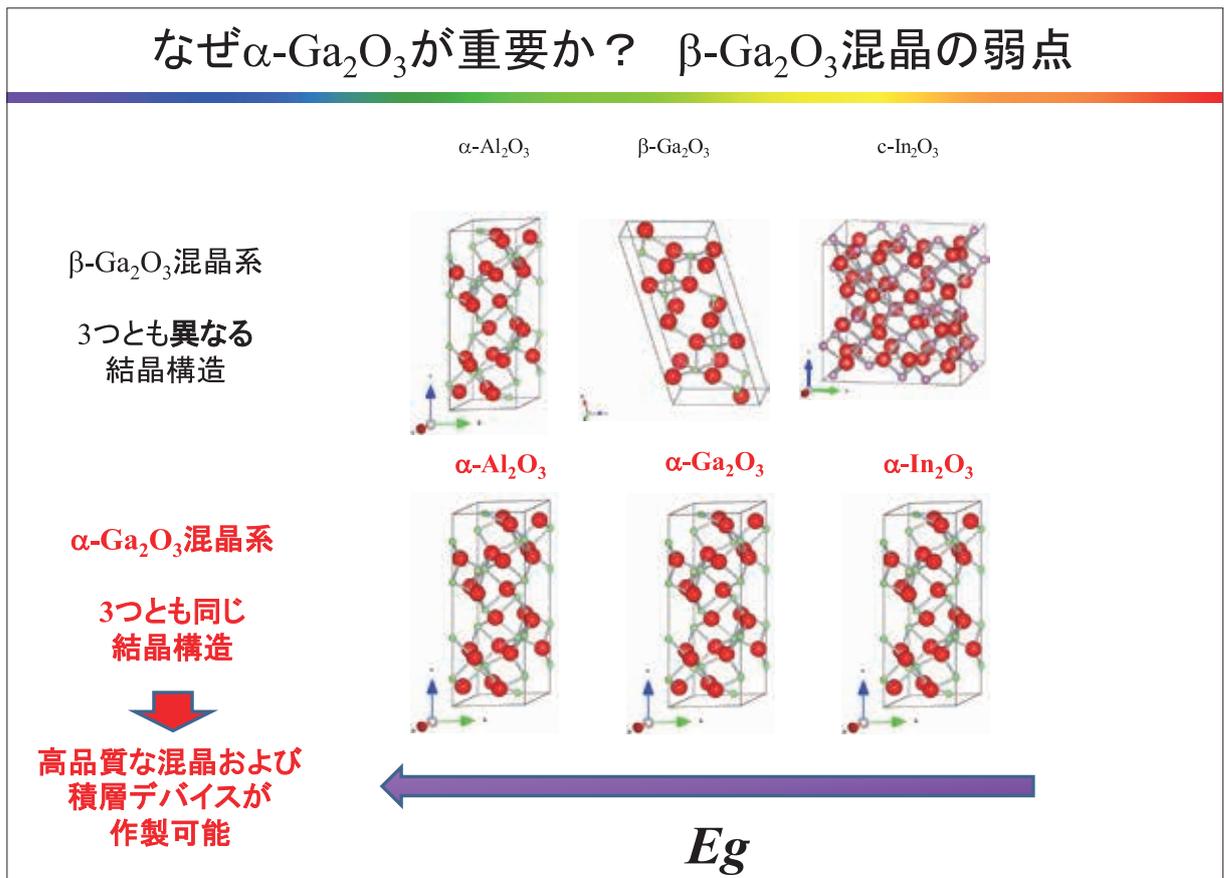


図 4-9-2

例えば、 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ でバンドギャップを広げたい場合は、結晶構造が異なるアルファアアルミオキサイド ($\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$: サファイア) と混ぜないといけない。一方、バンドギャッ

プを小さくしたい場合は結晶構造が異なるキュービック構造の $c\text{-In}_2\text{O}_3$ に混ぜる。つまり、バンドギャップを変えるときに、3つとも結晶構造が違うことになり、信頼性の高いパワーデバイスの作製は困難である。アルファ型は準安定相で作りにくかったが、バンドギャップを広げたり狭くしたりする場合も同じ結晶構造・美しい結晶形でできる。きれいな結晶構造を保ちながらバンドギャップを変えられることは半導体においては非常に重要である。例えば、3年前のノーベル賞になったガリウムナイトライド (GaN) もそうであるが、今まで販売されてきた半導体は全て同じ結晶構造でバンドギャップチューニングをしている。

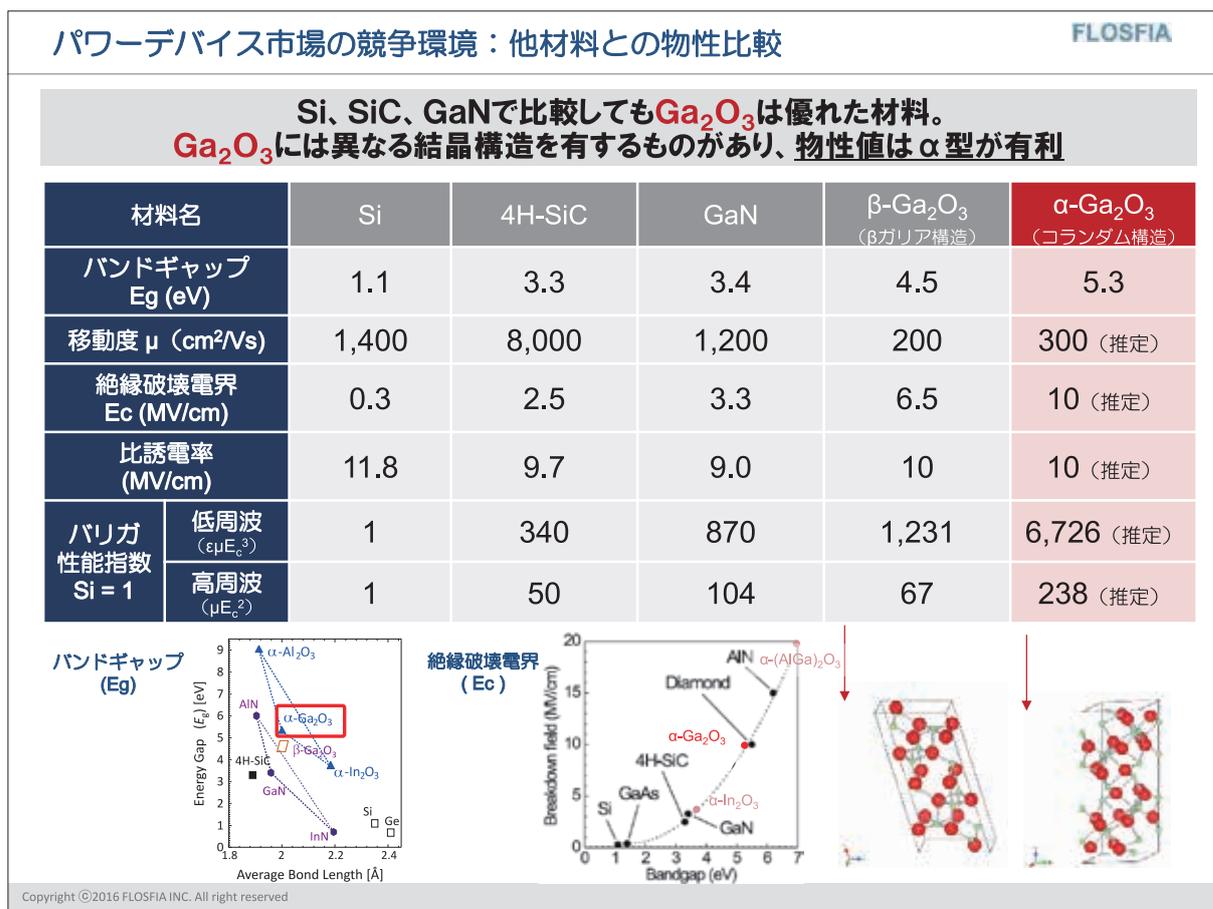


図 4-9-3

アルファに注目したもう一つの理由は、図 4-9-3 に示すようなその大きなバンドギャップである。パワーデバイスは電圧を上げたり下げたりする電力変換素子であり、高い電圧で使いたい用途に対して重要なのがこのバンドギャップである。バンドギャップが大きければ大きいほどパワーデバイスとしての性能が高くなる。現在のパワーデバイスとして使われているのはシリコン (Si) である。 $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ の出現で変わりつつある。 $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ のバンドギャップの値は 5.3eV と他の半導体より大きく、単膜で同程度のバンドギャップを持つのはダイヤモンドしかない。コストの点でダイヤモンドと $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ を比べると圧倒的な違いがある。おそらく、ダイヤモンドの値段は、我々の $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ の 100 万倍ぐらいする。物性値が高いのは大事だ

が、もう一つ大事なものはコストである。どんなに性能が良い夢の材料であっても、コストが高かったら普及しない。Si パワーデバイスに対して SiC も GaN も 100 倍程度のコストである。我々の $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ のコストは Si と全く同じである。このため、 $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ は Si を容易に置き替えることができる。

アルファ型を選んでベータ型を選ばなかったもう一つの理由は、材料がきちんと混ざることである。例えば、 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ を In_2O_3 と混ぜてバンドギャップを狭くする場合、 In_2O_3 の割合を多くしていくとだんだん In が析出していく。結晶構造が違うものを混ぜると析出が生じるのは当たり前であり、結晶の品質が低下しリーク電流が多くなってパワーデバイスに使えない。

パワーデバイスにおいて、 $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ の優れた理由は、同じ耐圧で Si や SiC に比べて薄くできることである。図 4-9-4 に示すように、パワーデバイス（ショットキーバリアダイオード、SBD）は電流が一方向にしか流れないデバイス（ダイオード）である。上部電極下の半導体層の厚さはデバイスの耐圧と抵抗に密接に関係し、半導体層の厚さが薄いほど耐圧は低下するが、抵抗が低下して大電流が流れる。耐圧は同じ半導体層厚ではバンドギャップが広いほど高いため、バンドギャップが広いということは半導体層を薄くでき、それだけで圧倒的に有利である。企業が求めるものは、大電流が流せて高耐圧のものであり、それを実現できるものとして $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ は有望である。

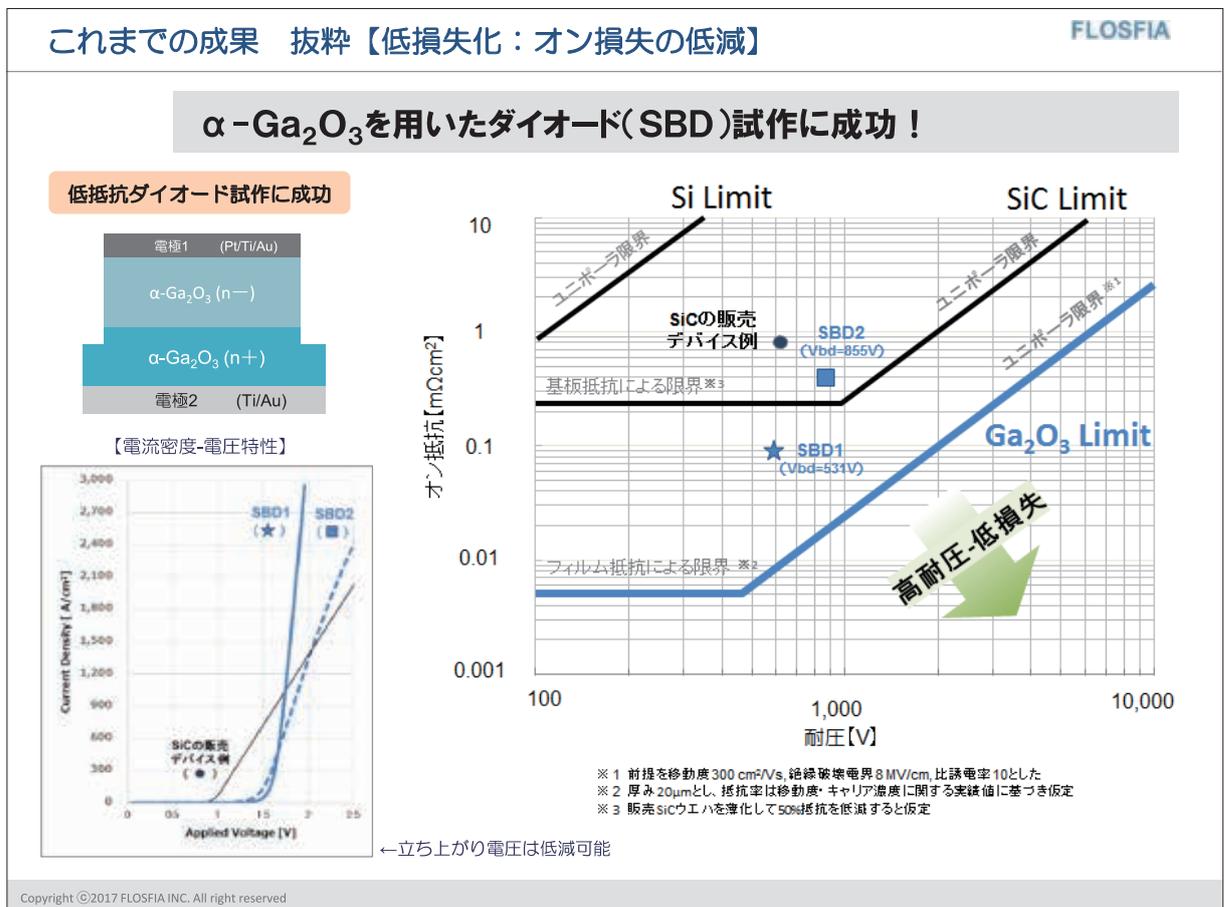


図 4-9-4

パワーデバイスで一番利益が出るところは、600Vの車載や、身近なところではACアダプターであり、今のところはこれらをターゲットにしている。今後はより高耐圧の電車に載せるものなども狙っていく。発電した電気が発電所から皆さんの手元に届くためには、6~7回変圧され、その段階で熱として電力ロスが生じ、半分程度まで減ってしまう。もし、 $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ が普及すれば、このロスを大きく減らすことができる。また、ACアダプターの例では、邪魔なACアダプターの大きな黒い箱をコンセント程度に小さくできる。 $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ なら、今のACアダプターの値段(2,000~3,000円)でつくることができる。電信柱の変圧器の場合は、見えない程度に小さくできる。さらに、現状のSiパワーデバイスより電力ロスが小さくなるため、電気自動車の航続距離は倍ぐらいにできると試算している。

我々の一番の主張点は、パワーデバイスは耐圧が大きく、オン抵抗が小さいことが理想的であり、図4-9-4に示すように試作した $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ のSBD1はSiCのユニポーラリミット(理論限界)を超えたところに位置しているということである。つまり、現時点で $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ は、SiCの理論限界さえも超えている。また、図4-9-5に示すように容量が圧倒的に小さく、スイッチング損失も少ないという特長も持っている。さらに、薄膜 $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ の活用や実装時の工夫により、SiCと同程度の熱抵抗を実現している。

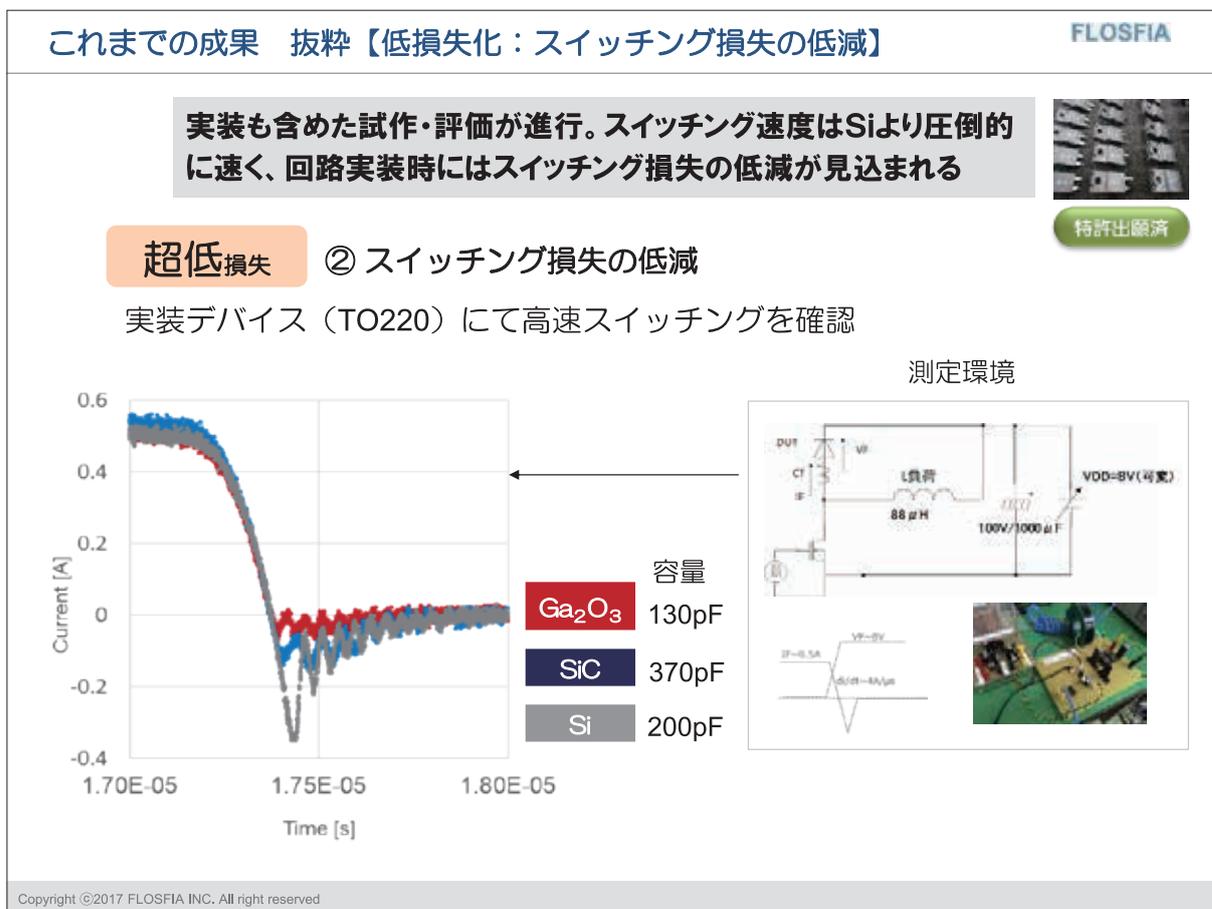


図4-9-5

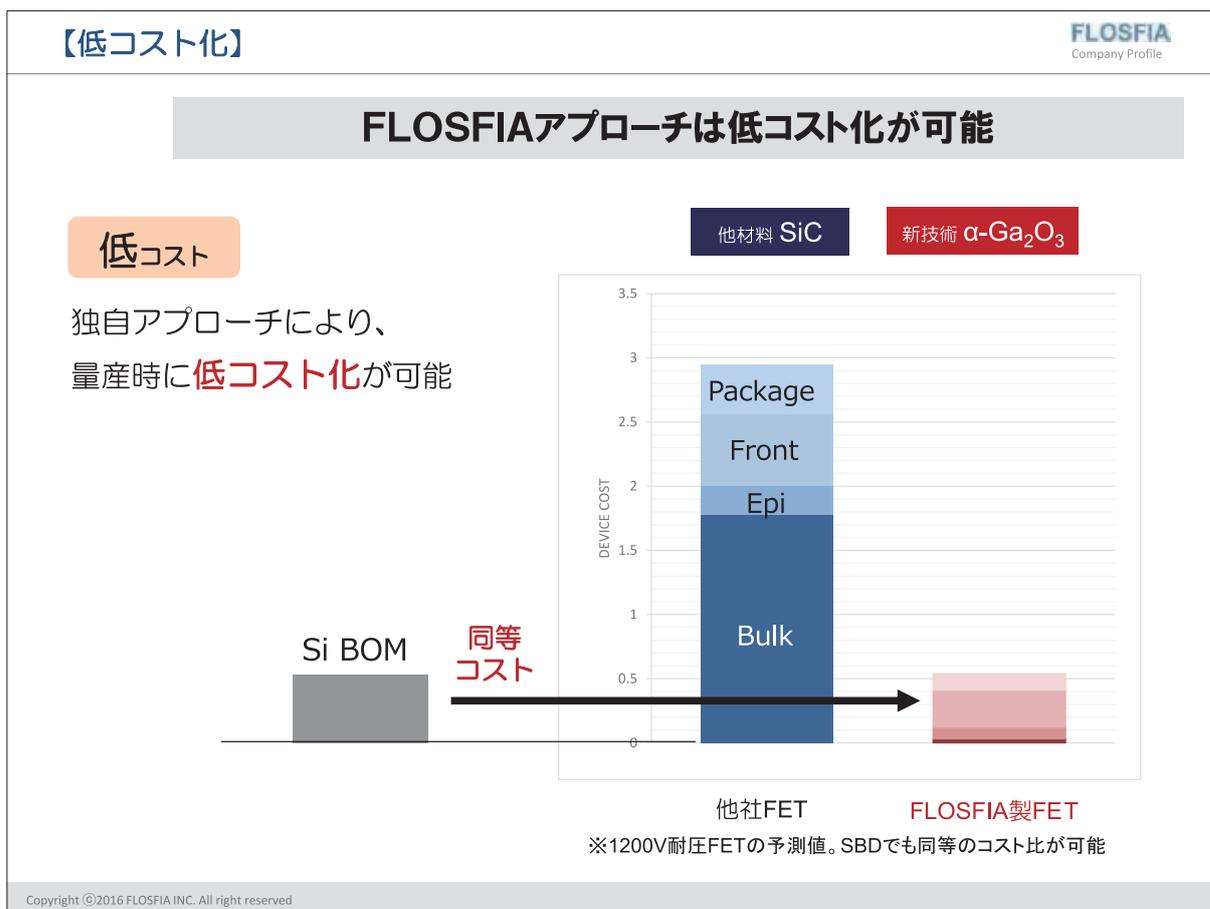


図 4-9-6

コストについては、図 4-9-5 に示すように Si と大体同じである。SiC が高い理由は、一言で言えば高温が必要だからである。SiC の結晶成長では 2,000 °C や 2,500 °C の高温が必要である。一方、 $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ では高温は不要で 500 °C 程度と低くて良いため安くできる。

$\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ は私が 2009 年に修士 1 年のときに始めたが、現在まで藤田研と FLOSFIA が独占状態で開発している。現在では、酸化ガリウムの研究が世界的に広まり、IWGO という学会が発足した。記念すべき第 1 回は京都大学桂キャンパスのローム記念館で行い、今年はイタリアのパルマで行われた。

また、今年の NEDO ベンチャー賞は、弊社 FLOSFIA がとった。IEEE の Spectrum にも FLOSFIA の $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ は圧倒的な性能を持っていると紹介されている。昨年 (2016 年) に日本のパワーデバイスを代表する人達を集めたパワーデバイスサミットという会議に酸化ガリウムの代表として呼ばれた。

【質疑応答】

Q：サファイアの上につくっているということは、電流を流す方向は横なのか。

A：縦方向（縦型）である。サファイア上にミスト CVD で 3 μm 程度の厚い膜を堆積し、ある技術を使って剥離し、それを上下に電極をサンドイッチして縦型のショットキーダイオードを作製している。

Q：大電流を流そうとすると、半導体の中に欠陥があると歩留まりが落ちるが、欠陥の程度はどうなっているのか。

A：幸運なことに、 $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ の場合はパワーデバイスの性能低減に直結する欠陥がなかった。直結しない欠陥はある。サファイア基板につけるとときには格子ミスマッチが4%程度あるので、それが全て刃状転移になる。しかし、刃状転移はパワーデバイスのリークに直結しないので、そのおかげで1 kVの耐圧が得られている。

Q：トランジスタの開発はどのようになっているのか。

A：今はMOSFETの開発を進めている。

Q：実装技術は大丈夫なのか。電極やパッケージの耐熱についての現状はどのようになっているのか。あまり温度の上がらない用途から使い出すのか。

A：実装の問題は全て解決している。すでにTO220のパッケージングで製品をつくっている。熱の問題は非常に重要である。SiCは熱を逃がしやすく優秀である。酸化ガリウムは熱がこもることが今までボトルネックであった。しかし、 $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ の場合は剥離できるので、除去した膜をヒートシンクの上に載せられる。これにより、SiCとほぼ同等な熱の伝導率を実現している。縦型ショットキーダイオードに関しては、このように完成度が高い。ただし、MOSFETに関しては課題があり、PチャンネルのMOSFETの開発などに取り組んでいく。

Q：これだけ良い技術であれば、他の研究機関もキャッチアップしようとすると考えられるが、どのような状況なのか。例えば、MOSFETとなると、開発はこれからということなので、追い抜かれる可能性もあるのではないかと心配する。

A：我々が縦型ショットキーダイオードの報告をしてから、多くの機関が $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ をつくらうとしている。しかし、我々が幸運だったのは、まず $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ ができていく結晶であるということである。他機関がまねをしたくても、まずミスT CVDを導入しなければならず、ミスT CVDを導入しても今度はデバイスレベルの $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ がつかない。我々は会社を設立してから今までに何万サンプルもつくっている。この蓄積を他の大学や企業がこれからやろうとすると、長時間かかると思う。縦型のショットキーダイオードにするときには、まず不純物の問題がある。次に剥離の問題もある。ほかの機関では剥離はできないだろう。このように様々な技術的課題があり、それを全てクリアして弊社に追い付くのはできないと思う。仮に一つ一つ段階を踏んだとしても、弊社は特許を150件程度出しているので、企業の場合はその特許を踏まずに事業化するのは無理と思う。我々は完全な先行者なので、材料からデバイスまで重要な特許は全てFLOSFIAが押さえているというのが現状である。

Q：国として「考えるべきことについて意見はあるのか。

A：会社には開発の競争力はあるが、JSTやNEDOにはもっと基礎的な研究を期待する。例えば、P型をつくるのが課題である。イリジウム($\alpha\text{-Ir}_2\text{O}_3$)とロジウム($\alpha\text{-Rh}_2\text{O}_3$)をつくるというので1つの解を出したが、これらとは違いう材料の探索といった重要な基礎的な技術も今後検討すべきであろう。

5. 第二部 総合討論

5. 総合討論

ファシリテーター 本間 格

本ワークショップ第一部でおこなわれた発表、質疑、発表者への事前アンケートの結果を踏まえて、以下の3つの論点で討議を行った。

- 論点 1. 目指すべき将来の電力・エネルギーデバイス・システムの共有
- 論点 2. 新技術開発・新機能創出の観点から、これからの研究開発課題、目標と方向性
- 論点 3. 研究開発制度、産学官連携の構造的課題を乗り越える方策

以下には、総合討論で挙げた主要な議論を項目ごとに要約して記載する。

論点 1. 目指すべき将来の電力・エネルギーデバイス・システムの共有 (再生可能エネルギーの規模感)

再生可能エネルギーのマーケットは急拡大しており、世界の発電量でテラワットを見込めるレベルになっている。

(再生可能エネルギーの導入可能量)

再生可能エネルギーの導入状況は国によって大きく異なる。まずは日本で考えた場合、再生可能エネルギーの割合を5割から6割にすることを目指すのが良い。

イタリアのシチリア島の例を見てみると、年間発電量の30%ぐらいが再生可能エネルギーである。5月と6月はエネルギー使用量の120%程度を再生利用エネルギーで発電できるため、月レベルで余剰が大量に発生してしまう。しかし多く発電できる分は、あえて発電させないことはできるので、インバーターを制御して余剰電力を発生させないようにする。その結果、年間発電量の30%以上が再生可能エネルギーになっている。シチリア島で行われているように、蓄電池を用いて電力を1日レベルで平準化すること、そしてまだ行われていない季節を通じた平準化すること、これをセットで考えて、日本では、再生可能エネルギー由来の電力を5割から6割にするという目標がよい。

(再生可能エネルギーの導入手法)

今の日本は、GDPの成長率が数%で、電力需要のニーズはGDP成長率と大体同じである。その中で、大幅に再生可能エネルギーを導入するには、何らかの経済的なインセンティブやトリガーが必要である。つまり、電力が足りているにも関わらず、どうして再生可能エネルギーに切り替えるのかという経済的な動機付けが重要となる。再生可能エネルギーに切りかえる際の経済的なメリットを明確化することが、投資の面から大事である。例えば、再生可能エネルギーで生まれる余剰電力をうまく使う、という点がある。余剰電力で水素をつくる、海水からマグネシウム、コバルトやリチウムなどを抽出する、農業に使う、魚の養殖用温水をつくるなどが考えられる。このように余剰電力を使ってどのよう

な新たな産業を作り出せるのか、という点が再生可能エネルギー導入のポイントと考えられる。

電力網ができ上がっている日本において、どう変えていくかと言う観点では、二重投資は難しい。しかし通信の例をとると日本は十二分なぐらいのレベルのアナログの通信網があったが、結局、デジタル化が進み、すごい勢いでインターネットが導入された。その結果、市場が拡大した。そこで、何かしらの需要に対してビジネスモデルを入れ、その投資を促進していく方法が考えられる。さらに限界コストゼロが達成できると、破壊力はすさまじい。

例えば余剰電力で電気自動車の充電を無料にするなど、産業を興すことができると、再生可能エネルギーの導入が進むのではないか。

今のエネルギーは、集中系になっているが、コンピュータの進化のようなダウンサイジングができれば、値段を超え、余剰を超えて人々が使い始めるのではないか。

(パワーデバイスの進化による電力ビジネスの変化)

高性能なパワーデバイスが普及したら、大型のX線装置の高圧電源がビール缶くらいになる、あるいは、パソコンのACアダプターがとても小さく目立たなくなる。これはパワーデバイスの進化による。この進化はブレークスルーを引き起こす。

1つ例として、データセンターがある。昔はデータセンターのフロアの3分の1ぐらいの面積が、無停電電源装置などの電源関係で使われていた。最大となる電力量を予想して建物を造る必要があった。しかし、今のデータセンターはコンテナ型が主流であり、電源からサーバーまで、簡単なコンテナをどんどん増やしていくという方式になってきている。これでも十分な性能とパフォーマンスが出せるということで、どんどん小型化している。このように、巨大なものに始めから大きく投資するのではなく、需要に合わせて増減させるようになって、結果的に需要は大きくなった。これと類似したことが日本のエネルギー需給でも起きるのではないか。

日本全体のエネルギー自給について、区など小さい単位でエネルギー需給を補完し合うことを考えたい。このような小さい単位での補完が増えていくことで、どんどん使い勝手が良くなる。その上で、昼間は使い放題だが夜は使えないなどの電力があれば、ユーザーのほうを使い方を考えるだろう。昼間の太陽光由来電力のように電力が安い場合は、例えば電気自動車への充電など使用電力を増やしていくこともありえるだろう。

ネットワークとスマート化による分散型電源の利用で、電力のビジネスモデルが大分変わるだろう。

分散電源の処理では、パワーデバイスが重要になる。直近では50Hzと60Hzの変換の問題がある。各地で、特に北海道と東北で風力発電が増えてくると余剰電力が生まれる。この余剰電力を関西まで持っていくときには、変換素子としてのパワーデバイスというのは、系統安定化にとってのキーになる。現在使われているシリコン系より安く小型化できることが重要であり、シリコン系より優れた材料の開発が期待される。

(電力の時間的シフト、場所のシフト)

将来のエネルギーは、電力化比率が増えること、また、分散型に向かうことが間違いない。このときに一番重要な技術は、電力の時間的移動と空間的移動の技術である。

時間的移動とは、例えば蓄電池に蓄える、もしくはケミカルエネルギーに変換する。空間的移動は、エネルギーを何か別のもの、例えば水素などの化学物質に変えて、ローリーで運ぶなどが考えられる。電力化比率が高まると、電力をいかに時間的に、あるいは空間的に動かすのが重要になり、様々な要素技術が生かされていくだろう。再生可能エネルギーに限らず、あらゆるエネルギーをどのように移動させるのかというところが重要になる。

再生可能エネルギーの導入量が使用電力の5割、6割というレベルになると、日本国内だけで数百テラワットアワーを時間、距離移動させることになる。途方もない量であり、それに用いるデバイス、材料の開発はきわめて重要となる。個々のデバイスの特性向上だけではなく、低エネルギーで製造することや、寿命を迎えたデバイスの廃棄、リサイクルの問題が顕在化する。

(実際の分散型システムのしくみ)

電力をネットワーク型にしていくことは、簡単なようで非常に困難なことである。場合によっては大きな電力が小規模な電力網に流入する。そして、トランスも逆向きに流れる。現在のネットワークは、大手の電力会社が送電系を守っているが、送配電分離になり、さらに分散型電源になったときに誰が電力系統や安定供給を保障するか。どのような形で電力系統の安定性を保障していくか、これは非常に難しい問題である。

考えられる基本的な進め方は、発送電分離をして、系統においては送配電の会社が責任をとる。電力広域的運営推進機関(OCCTO)などの広域連携設備というところがあり、この系統連携の邪魔をしない形でどうやって分散型のものを載せるかが課題である。具体的には市場型で、個対個のマッチングである。電力が余っている顧客と不足している顧客をマッチングする仕組みをとらせる。これは株式市場と同じであり、たとえば、ある時間帯、2時から3時の間に1キロワットアワー売りたい人と買いたい人が30円で成約をして、2時になったら実行しますという契約が大量にあるという考え方である。すなわち同時同量であり、同じ時間帯に同じ量を送って使っているのだから、それらがいくらあっても周波数変動には大きな影響を与えないことになる。

(再生可能エネルギー大量導入時代の使い方)

再生可能エネルギーの問題は、誰も電気を使っていないときに大量に発電したり、誰も発電していないのに大量に電力を使う必要が生じたりするということである。分散型でこれを担保するための仕組みとして、市場のマッチングの機能を入れ、その予約に基づいて電力をデリバリーすることを電力のインターネットとして研究している。これにより、中央制御ではなく個々の分散型の契約の固まりになる。系統に負担をかけずにデリバリーできることを想定して進めている。

電力系統のメンテナンスをするのは送配電会社になる。一方、託送料が上がってくると、電力利用者は自家発電を入れて、自営線で送るようになり、系統に流れない電気が増えてくる。このように自営線を張ると託送料は値下げされるので、利用者は再び系統を使い始める。このようなことが実際にヨーロッパで起こり始めている。

日本ではそうならないように、今の設計思想では基本的に系統線を使うことにしているが、自営線も技術的にはできる。自営線にすると自分たちでメンテナンスする、市町村あ

るいは団地レベルで管理する形になる。

概算すると、1日に使用する電力量の1割ぐらいを蓄えられる電池があれば、その系は安定動作することになる。これはスムーズに動いた場合である。この前提で、電力価格がどれくらいになるかを試算している。充放電1回で10円ぐらい利益が出るような形で、1日に1~2回の取引、蓄電池の充放電1回ぐらいの使い方を想定すると、1年で300回、10年で3,000回の充放電を行い、1回10円ぐらいで元がとれそうだ。このような蓄電池のシステムが出てくれば、この蓄電池システムは爆発的に売れそうだ。

(電力貯蔵の考え方)

電気を貯めることは難しい。蓄電池は、実は貯めた電気は、時々刻々減っていくので、貯めている時間は短い。そのため、光合成のように化学物質に変換することも有望である。

水素化するのはその一手段である。電池は1日もしくは1週間ぐらいで、充電して放電するくらいが経済的に良い。使えば使うほどもとがとれる。一方、5月、6月に電力が大きく余って冬に使うなど、長期間の時間シフトに関しては、化学的な変換をして貯めておくというのが向いている。

例えば船舶を走らせたり、飛行機を飛ばしたりするときには、エネルギー密度の関係から電気では難しい。ここは化学燃料が向いており、そのための人工光合成が期待される。

(国情による違いへの考え方)

電気を使っていない国の人々が十数億人いる。アフリカのある例では、電線が張られていない地域で、彼らを買っている電気は1kWhあたり3,000円である。1日の支払いは30円。レストランに対して、ライトをつけて深夜営業すると儲かるということで、夜に電池でライトがつくようにした。このような提案だと電力はこの値段になる。効率化の考え方が国情によって違うことに注意が必要である。

(新たなサービス)

日本の電気は、社会を下支えするインフラであり、安定供給が最重要である。一方、電気を活用する部分でビジネスが分かれていく。そこで新たな市場を作ることができると「電気は同じ」ではなく、差別化でき、新たな世界が広がる。

エネルギー単体ではなく、サービスのセットで売ることによって社会が変わるかもしれない。

論点 2. 新技術開発・新機能創出の観点から、これからの研究開発課題、目標と方向性 (研究の進め方)

太陽電池、リチウムイオン電池などの開発では、最初は日本が先行したが、市場では後れを取るような状況になっている。国も産業界も初めは一体となって進めた。しかし、実用化が進むと研究の手を緩めており、これが敗因の一つではないか。実用化が始まっても基礎研究の手綱を緩めないことが必要である。

中国では、地方や大学名などに関係なく全国津々浦々をファンディングエージェンシーに当たるところがよく見て優れた研究者とテーマを抽出している。

(デバイスの低コスト化とリサイクル性向上)

コストを安く、エネルギーが少なく生産するためには、低温でものづくりができるプロセスが重要になる。低温プロセスでは、界面のミキシングなど、電池における問題も解決できる。

低温プロセスには、様々なメリットがあるにも関わらず、低温で合成する科学はあまり行われていない。例えば、今までの電池屋は、電極材料を高温で焼いていたが、ここは発想の転換が必要なところである。

もう一つは、リサイクル性の観点である。高温プロセスでは材料が非常に安定になり、リサイクルするとき分解が難しくなる。しかし、低温で安定な材料、デバイスを作ることができると、高温にして分解し、再利用がしやすくなる。社会実装の観点からは、そういう方向に行くべきである。作りやすく、解体しやすく、再利用しやすく、機能性に優れた新しいコンセプトのデバイスが必要であり、そこでは、低温合成のプロセスや物理化学が重要になる。今は変換効率や初期特性が重要視されているが、今後の社会実装を考えて、システム移行、導入しやすいデバイスを開発することがイノベーションに繋がる。

論点 3. 研究開発制度、産学連携の構造的課題を乗り越える方策

(学際研究)

電気化学の学会と固体物理の学会との界面のような研究領域をブレイクしていくことが重要である。若手研究者が集まるようなプロジェクトを作ることや、1つの課題に対して違う分野の人が集まって取り組むように設定することによって、異分野の壁を破ることができる、研究者の行き来がスムーズにいき、おもしろい発想がどんどん生まれていく。

サンシャイン計画のアモルファスシリコン太陽電池の研究は、国プロによる課題設定的な予算の中であって、大学では自由に研究することができた。また、化学、物理、デバイスの分野の壁を取り払い、学際的な研究開発が行われ、世界でトップのデバイスができた。

大学や学会が何か見識を持ってやるところに突破口がある。自分たちの興味と、何をやらなくてはならないかという議論の中から、具体的なやり方を考えていくことが重要である。

大学自身が自分たちのイニシアチブで、お金をかけてセンターをつくることも必要である。例えば、スタンフォード大の Bio-X では、13 学科ぐらを集めてオフィスをつくり、自分たちでプロジェクトを持ってきている。異分野の研究者が空間を共有して、日々の衝突確率を増やすように建物から工夫をしている。歴史的に見ると、米国では 100 年前にベル研がそれをやった。ベル研究所を建てたときに、建物を空間的にデザインして、異分野の研究者をいかにコンタクトさせるか考えた。また、ドイツの例では、1970 年代にシュトゥットガルトのマックス・プランク固体物理学研究所が、異分野をどうやって融合させるかという観点で、これを加速するために建物の設計までやった。国の施策を待っているわけではなく、自分たちで乗り出して工夫して進めた。そこが一番大きなところである。

研究者の努力でできることもあり、場所を一緒にするとか、共同研究の中で学生をコンタクトさせ、話し合わせるというのが良い。米国ではそれをやっている。学生のオフィスを共同研究センターの中に作り、壁を低くしてそこへ全部一緒に入れることで学生が自然にいろいろな共同研究を展開していく。

製品の完成度を上げるというよりは、システム全体の完成度を上げて、全体としてきち

んとワークするような設計をしようまく行っている例がある。一つの手法で完璧を目指さないで、いくつかのやり方を同時に進めると、異分野融合が進み目指すものが共有化されて活発な議論ができる。

(イノベーションへの施策)

政府主導のプロジェクトはうまくいかないとされる。研究所レベルなど、もっと現場レベルのところリードしたほうがアウトプットは大きい。

JSTが企業からファンドを募るなどして独自の予算を持ち、プロジェクトを進めることができる、もっと良くできるのではないかと。大学が材料を持っていても、使い手の企業との橋渡しができている面がある。スケールアップができず、企業がまだ興味を持っていないような研究とのギャップを埋めるのも重要である。そこを担う独自のファンドによって、実用化へのギャップが埋められないか。

(研究課題と申請)

最近では、競争的資金の申請書は明確なシナリオが書かれているものほど高得点がつくような審査基準になっている。しかし、シナリオは明確でなくともユニークなアイデアを評価する観点から審査にはあったほうが良い。それがイノベーションを生む方法であると思う。シナリオありきでは、研究者は小さな予想できることしかやらない。

(産学連携とプライシング)

MITなどでは、企業から目的研究で大きな資金を出してもらい、その資金で2~3割から半分ぐらい企業依頼テーマ以外の自由な研究を進めている。日本ではコストオンでしか予算をとれない仕組みになっており、MITに比べて1桁か2桁ほど小さい企業からの資金で産学連携をしている。このために競争的資金も含めて、共同研究をいくつも回さないと研究室が成り立たないようになっている。もう少しプライシングの自由度があると良い。

(まとめ)

総合討論では、図5-1に示すような方向性が示された。

- ・ 今後、再生可能エネルギーの大量導入が始まると、電力の扱い方が変わる。変動する創電への対応のための蓄エネルギー、非同期創電のための直流化が行われる。これによりパワーデバイスの進化も必要となる。
- ・ 多くの創電デバイス、蓄電デバイスを製造して社会実装するために、個々のデバイスの特性向上の他、製造に要するエネルギー削減、デバイス類のリサイクルの観点も必要である。
- ・ このためには低温合成プロセスによる材料特性の革新が期待される。また、準安定相の活用、高エントロピー化によって、革新的な材料が生み出される可能性がある。
- ・ 革新的なデバイス、材料の創出には、たとえば電気化学と固体物理研究者の共同作業が必要である。異分野の研究者が集うことのできるテーマ、領域の設定が重要である。

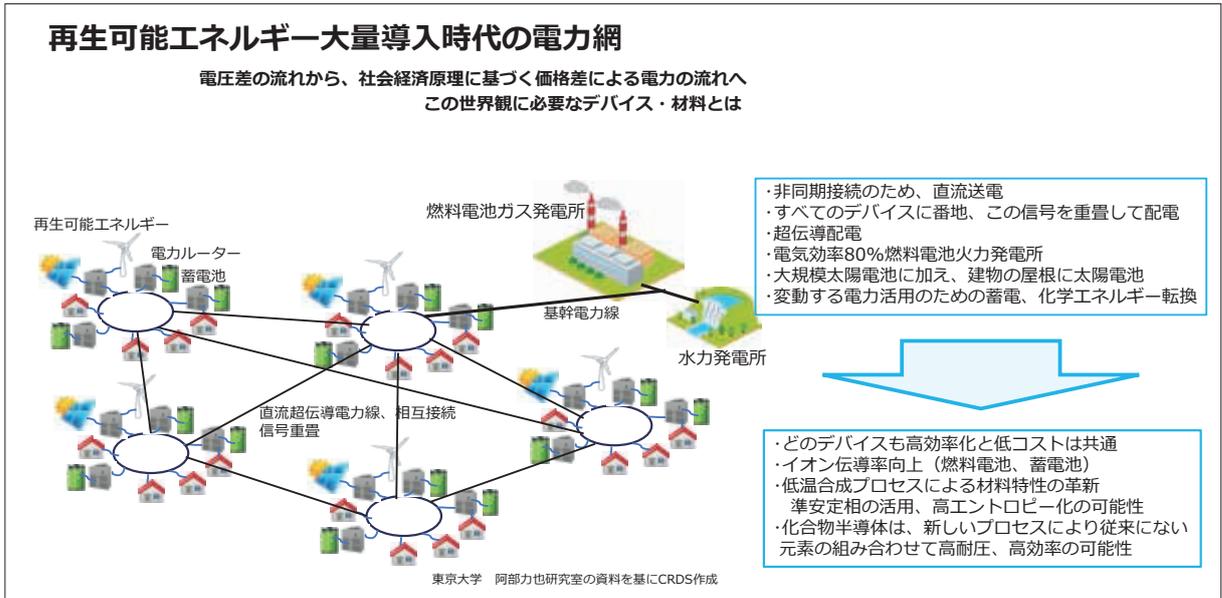


図 5-1

付録

付録 1：開催趣旨・プログラム

開催趣旨

物質・材料および様々なデバイス研究開発の最先端を担う象徴的技術であるナノテクノロジーは、異分野の融合を促進し、多様な応用を実現する技術領域として発展してきました。新しい科学技術や新たな産業の創出ばかりでなく、グローバル課題の解決あるいは社会の期待に迅速に応える科学技術基盤の一つとして、ナノテクノロジー・材料は位置づけられます。

CRDS では 2017 年 4 月に、本分野における世界各国の国家計画、投資戦略、研究ポテンシャル、技術進化そして産業動向、主要な研究開発領域を含む分野全体を俯瞰した俯瞰報告書 2017 年版を発行しました。報告書では、CRDS が抽出した 37 の主要研究開発領域について研究開発状況や国際比較を取り纏めています。新たな研究動向や変化・進展のきざしなど、さらなる調査・検討が必要な領域がまだ多数あると認識しています。そのため今年度は、いくつかの領域に注目して本分野の俯瞰をさらに充実させます。こうした経緯から、CRDS では今年度、ナノテクノロジー・材料分野の俯瞰活動の一環として、本ワークショップを計画いたしました。

今回のワークショップでは、ナノテクノロジー・材料分野がインパクトを及ぼすエネルギー分野、特に創エネルギー、蓄エネルギー、電力変換などに注目し、高性能化や新機軸に関わる材料・デバイス研究開発動向を広く俯瞰することを目的とします。所望の機能を実現させる材料の設計・制御手法や、サイエンスの新局面を拓く方向性、低炭素社会を支える新しい技術の芽などを議論します。第 5 期科学技術基本計画の先を見据えて、基礎的な科学技術知見の充実や、未来社会へインパクトを及ぼす研究開発の方向性・課題等を、専門家間で議論し発掘したいと考えています。

なお、本ワークショップの結果はワークショップ報告書として取りまとめるとともに、CRDS 俯瞰報告書 2019 年版にエッセンスを反映する予定です。また、CRDS における戦略立案に活用するとともに、各界における施策立案等に活用いただくことを念頭に置いています。

プログラム

(敬称略)

日程：2017 年 12 月 13 日（水）10：30-17：50

会場：TKP 市ヶ谷カンファレンスセンター カンファレンスルーム 6D

	オーガナイザー	曾根 純一 (JST-CRDS)
	ファシリテーター	本間 格 (JST-CRDS、東北大)
	司会	小名木伸晃 (JST-CRDS)
10:30-10:35	開会挨拶	曾根 純一 (JST-CRDS)
10:35-10:40	趣旨説明、事務連絡	小名木伸晃 (JST-CRDS)
10:40-11:00	コーディネーター説明	本間 格 (JST-CRDS、東北大)

11:00－16:00	第一部 電力・エネルギーデバイス・システムの提案	
11:00－11:25	将来の電力システムと求められるデバイスの姿 ～CO ₂ フリー・低コスト電力の模索～	田中 謙司 (東大)
11:25－11:50	これからの太陽電池研究開発 超低コスト型・ 低環境負荷材料の可能性	嘉治 寿彦 (東農大)
11:50－12:15	人工光合成の挑戦、材料・デバイス・システム化	阿部 竜 (京大)
13:10－13:35	燃料電池 高効率・高耐久性を実現する材料・デバイス開発	八代 圭司 (東北大)
13:35－14:00	蓄電デバイス (1) 高入出力・安全な分散型蓄電器を 酸化物系・全固体型で目指す	一杉 太郎 (東工大)
14:00－14:25	蓄電デバイス (2) 大規模蓄電器 レドックスフロー型の 革新の方向性	佐藤 縁 (AIST)
14:45－15:10	高温超伝導材料・デバイス技術の将来シナリオと可能性	水口 佳一 (首都大)
15:10－15:35	熱電変換 低温域・温度差 100℃以下での 機能実現を目指した研究開発	末國晃一郎 (九大)
15:35－16:00	パワーエレクトロニクス 低損失・低コスト型新材料の開発方向性	金子健太郎 (京大/株 FLOSFIA)
16:10－17:40	第二部 総合討論	ファシリテーター 本間 格
	論点 1. 目指すべき将来の電力・エネルギーデバイス・システムの共有	
	論点 2. 新技術開発・新機能創出の観点から、これからの研究開発課題、 目標と方向性	
	論点 3. 研究開発制度、産学官連携の構造的課題を乗り越える方策	
17:40－17:45	まとめ	本間 格 (JST-CRDS、東北大)
17:45－17:50	閉会	曾根 純一 (JST-CRDS)

付録 2：参加者一覧

(敬称略、所属・役職はワークショップ開催日時点のもの)

招聘識者

(発表者)

- 阿部 竜 京都大学大学院工学研究科 教授
- 嘉治 寿彦 東京農工大学大学院工学研究院先端物理工学部門 准教授
- 金子 健太郎 京都大学大学院工学研究科 助教、株式会社 FLOSFIA CSO & 共同創業者
- 佐藤 縁 産業技術総合研究所 省エネルギー研究部門 研究グループ長
- 末國 晃一郎 九州大学大学院総合理工学研究院 准教授
- 田中 謙司 東京大学大学院工学系研究科 特任准教授
- 一杉 太郎 東京工業大学物質理工学院 教授
- 水口 佳一 首都大学東京理工学研究科物理学専攻 准教授
- 八代 圭司 東北大学大学院環境科学研究科 准教授

(コメンテーター)

- 中村 振一郎 理化学研究所産学連携本部中村特別研究室 室長
- 宮内 昭浩 株式会社日立製作所 研究開発グループ材料イノベーションセンタ
主管研究員
- 吉田 真 京セラ株式会社 研究開発本部メディカル開発センター 所長

JST-CRDS ナノテクノロジー・材料ユニット

- 曾根 純一 上席フェロー
- 永野 智己 フェロー・ユニットリーダー、JST 研究監
- 荒岡 礼 フェロー
- 伊藤 哲也 フェロー
- 小名木 伸晃 フェロー
- 河村 誠一郎 フェロー
- 佐藤 勝昭 フェロー、JST 研究広報主監
- 中山 智弘 CRDS 企画運営室長
- 馬場 寿夫 フェロー
- 宮下 哲 フェロー
- 清水 敏美 特任フェロー、産業技術総合研究所 フェロー
- 田中 一宜 特任フェロー、産業技術総合研究所 名誉リサーチャー

関係府省・機関

- 夏目 種 内閣府 政策統括官 (科学技術・イノベーション担当) 付
産業技術・ナノテクノロジーグループ 政策調査員
- 三須 義竜 内閣府 政策統括官 (科学技術・イノベーション担当) 付
産業技術・ナノテクノロジーグループ 政策調査員
- 坂元 亮介 文部科学省 研究振興局 参事官 (ナノテクノロジー・物質・材料担当) 付 係員

- 石田 一郎 経済産業省 製造産業局 製造産業技術戦略室 重要技術管理専門職
- 成毛 治朗 新エネルギー・産業技術総合開発機構 技術戦略研究センター
ナノテクノロジー・材料ユニット 主任研究員
- 中村 孝夫 新エネルギー・産業技術総合開発機構 省エネルギー部 主査
- 二上 優人 新エネルギー・産業技術総合開発機構 省エネルギー部 主査
- 齋藤 英紀 新エネルギー・産業技術総合開発機構 材料・ナノテクノロジー部 主査
- 多井 豊 新エネルギー・産業技術総合開発機構 材料・ナノテクノロジー部
主任研究員
- 西村 睦 物質・材料研究機構 経営企画部門 部門長

JST

- 中村 亮二 CRDS 環境・エネルギーユニット フェロー・ユニットリーダー
- 尾山 宏次 CRDS 環境・エネルギーユニット フェロー
- 高橋 玲子 CRDS 環境・エネルギーユニット フェロー
- 三枝 邦夫 低炭素社会戦略センター 主任研究員
- 井上 智弘 低炭素社会戦略センター 研究員
- 米澤 美帆子 低炭素社会戦略センター 研究員
- 大塚 健司 環境エネルギー研究開発推進部 フェロー
- 沼澤 修平 戦略研究推進部 主査
- 水本 邦彦 研究プロジェクト推進部 主任調査員
- 下枝 弘尚 研究プロジェクト推進部 主査
- 松尾 一郎 知的財産マネジメント推進部 特許主任調査員

■ワークショップ企画・報告書編纂メンバー■

曾根 純一	上席フェロー
小名木 伸晃	フェロー
永野 智己	フェロー／ユニットリーダー
荒岡 礼	フェロー
伊藤 哲也	フェロー
河村 誠一郎	フェロー／エキスパート
佐藤 勝昭	フェロー
馬場 寿夫	フェロー
宮下 哲	フェロー
本間 格	特任フェロー
伊藤 聡	特任フェロー
清水 敏美	特任フェロー
竹村 誠洋	特任フェロー
田中 一宜	特任フェロー
田中 秀治	特任フェロー
玉野井 冬彦	特任フェロー
馬場 嘉信	特任フェロー
村井 眞二	特任フェロー

※お問い合わせなどは下記ユニットまでお願いします。

CRDS-FY2017-WR-10

CRDS 俯瞰ワークショップ報告書

ナノテクノロジー・材料分野 区分別分科会

「再生可能エネルギー大量導入時代を見据えたエネルギー材料・デバイス研究開発」

平成 30 年 3 月 March 2018

ISBN978-4-88890-581-7

国立研究開発法人科学技術振興機構 研究開発戦略センター
ナノテクノロジー・材料ユニット
Nanotechnology/Materials Unit, Center for Research and
Development Strategy
Japan Science and Technology Agency

〒102-0076 東京都千代田区五番町7番地

電話 03-5214-7481

ファックス 03-5214-7385

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

© 2018 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.

ISBN 978-4-88890-581-7

