

NIMS NOW

NATIONAL INSTITUTE FOR MATERIALS SCIENCE

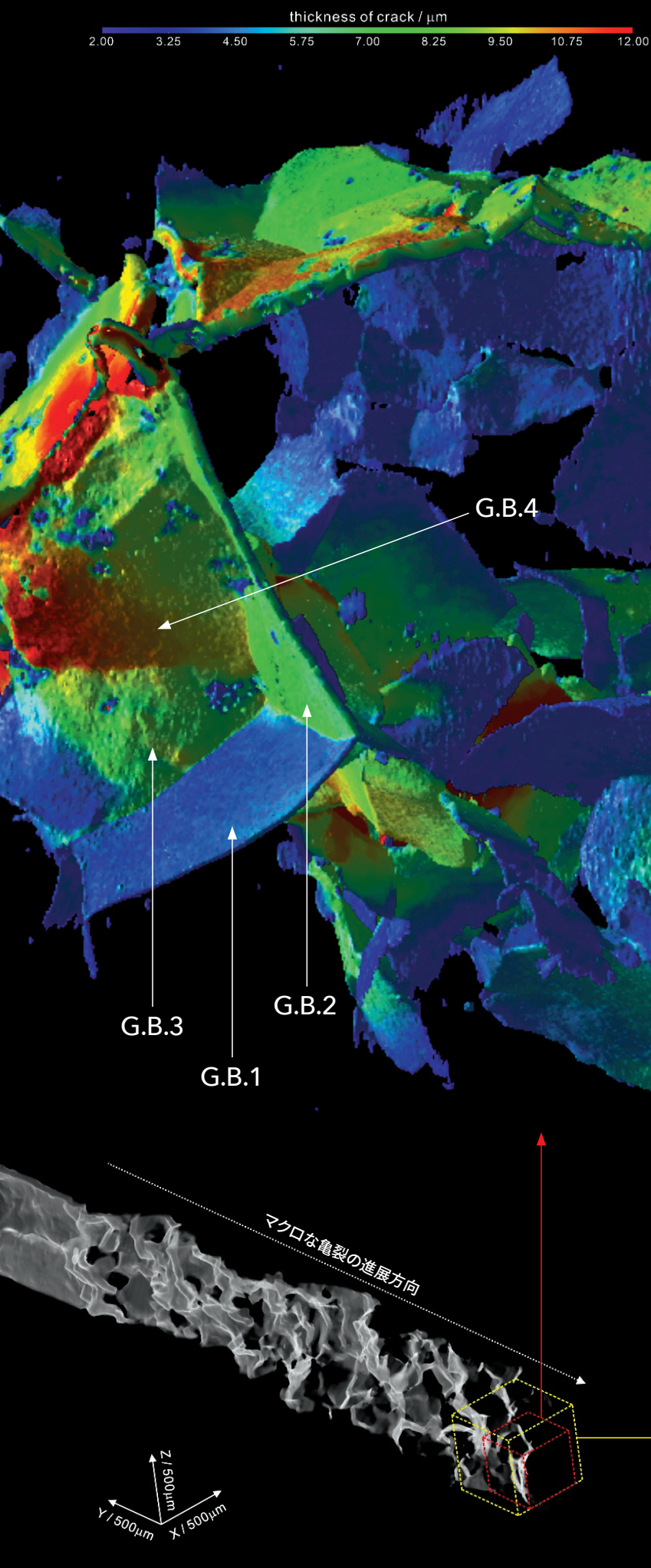
2025
No.3



水素エネルギー活用への挑戦、総力戦

WEBマガジン始動!





水素攻略

水素エネルギー活用への挑戦、総力戦

脱炭素のカギを握る、水素エネルギー。
その大規模供給の実現に立ちはだかる壁を突破するには、
水を電気分解して水素を「つくる」、
水素を液化して「ためる（はこぶ）」、
安全かつ高効率に「つかう」——
この3つのフェーズにおける技術革新が欠かせない。

その核心にあるのが「材料」だ。
材料の性質ひとつで、水素製造や液化の効率も、安全性も劇的に変わる。
有用なエネルギーでありながら、材料に「もろさ」というリスクをもたらす水素。
NIMS は今、「つくる・ためる・つかう」のすべての段階で、
リスクと向き合い、材料のチカラを最大限に引き出すための研究を展開。
水素社会の実現に向けて、知と技術を結集した挑戦をつづけている。

金属の寿命に深刻な影響を及ぼす水素脆化。柴田暁伸は、鉄鋼に水素を吸収させた「水素チャージ材」と「未チャージ材」、それぞれに引張応力をかけた際の亀裂の挙動をマルチスケールに解析し、鉄鋼の破壊メカニズムの解明に挑んでいる。その手法の一つが、X線コンピュータトモグラフィ（X線CT、表紙写真）だ。この手法では、鉄鋼の亀裂断面を可視化できる。カラー画像は、水素未チャージ材において亀裂が開口した量（開口変位）を色分けにより可視化したもの。ここでは、結晶粒の境目（粒界）に沿って破断した箇所（G.B.1～G.B.4）を対象に、粒界平面に作用した応力と、開口変位との相関を調べた。具体的には、試験体の引張方向に対する粒界平面の角度をもとに、それぞれの粒界平面に作用した応力を算出。開口変位との相関を調べた結果、両者に強い相関は見られなかった。このことは、亀裂の挙動は単純な力学的条件だけでなく、複数の粒界が織りなす微細構造に左右されることを示唆している。モノクロ画像（下部の右2点）は、水素チャージ材と未チャージ材の比較。どちらも、亀裂の伝播が途切れた箇所（黄色矢印）が見えてくるが、水素の含有量が多いほど亀裂は連続的に伝播していた。そのなかで、柴田は水素を多く含有しながらも“亀裂が途切れた”箇所に着目。その近傍の微細組織を詳細に観察し、亀裂の伝播を抑制し得る微細構造設計のヒントを見出した（詳細はP.10へ）。

Akinobu Shibata et al., Acta Materialia vol234, 118053 (2022). DOI:10.1016/j.actamat.2022.118053

水素未チャージ材

水素チャージ材

水素をつくる

AIや数理モデルの活用で切り拓く水素の大量製造への最短パス

再生可能エネルギー由来の電気、水を分解(水電解)してつくるグリーン水素。その大量製造を実現するため、水電解装置用の電極触媒の開発やメカニズム解明に、データ駆動型手法を活用しているのが坂牛健チームリーダーらだ。

最長6年の実験をわずか1カ月で完了

水素社会の実現に向け、水(H₂O)に電気をかけて水素(H₂)と酸素(O₂)に分解する「水電解」と呼ばれる技術が注目を集めている。その仕組みは、2つの電極触媒(陽極と陰極)を水に浸して電気を流せば、それぞれからH₂とO₂が発生するというものだ(上写真)。シンプルな仕組みだからこそ、「電極触媒」の性能がグリーン水素製造の効率と直結する。

現在、水電解装置において、O₂発生側の電極触媒には、イリジウムやルテニウムといった高価で希少な白金族元素が必須で、導入拡大の足かせとなっている。そうしたなか、注目されているのが、複数の元素を混ぜ合わせた多元系の材料だ。地球上にありふれた元素(汎用元素)でも、複数種類を混ぜ合わせることで、特性が劇的に変化することが知られている。

しかし、元素の組み合わせや混ぜる比率など、組成のバリエーションは無数にあ

る。そこで、AIを使って短期間で、高い触媒性能を示す多元系材料を発見しようというのが、坂牛らの研究チームの戦略だ。坂牛は次のように説明する。「戦略の一例はこうです。まず、日本における資源バランスや元素の埋蔵量を考慮して、多元系材料の候補となる約10種類の元素(鉄や銅、亜鉛など)を選択します。そのうち5つの元素を組み合わせた組成をランダムに10個選び出し、電極をつくります。それを用いて水電解実験を行い、得られた電気化学特性データをAIに学習させます。そして、AIが有望な組成を提案したなかから、実際に電極を作製し、電気化学特性データを学習・予測させるプロセスを繰り返していきます。

そのようにして、2023年に見出したのが、マンガン・鉄・ニッケル・亜鉛・銀からなる電極触媒です。用いたAIは、『ベイズ統計学』を基盤とするシンプルなもので、田村亮チームリーダー(データ駆動型アルゴリズムチーム)と相談して考案し

ました。そのAIは、比較的少量のデータを学習させただけで、最適な組成を提示してくれました。従来であれば最長6年かかる実験を約1カ月間で完了できたのです(NIMS NOW Vol.24 No.1 P.2、P.15に関連情報)」(坂牛)

探索時間の短縮を叶えた“人とAIとの協働”

実は海外でも、AIを活用して水電解用の電極触媒を探索する試みは先行して行われていた。10年間にわたり、約200人の研究者を投じたその大型プロジェクトは、前半の5年間だけでも1700億円を超える研究費を費やしながらも、有用な材料を見出すには至らなかった。

かたや、坂牛らが要したのは、1年半という短期間で、メンバーは5人。海外のプロジェクトより4ケタも少ない研究費で、高性能な電極の探索に成功している。坂牛は、その成功要因をこう分析する。

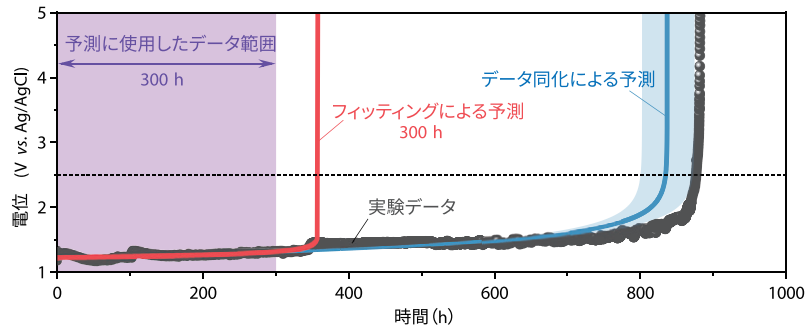


図1 データ同化による電極触媒の寿命予測の結果

まず、電極が溶出する様子を再現する数理モデルを構築し、電極触媒の劣化を予測した。数理モデルによる予測(赤)のみの場合、次第に実測値(黒)からの乖離が大きくなっていった。それに対し、実測値を取り込んでパラメータを最適化していく「データ同化」という手法を数理モデルに適用した場合、300時間分の実測値を用いるだけで、高精度な予測が可能になった。

「AIの予測精度は、学習させるデータの質によって決まります。海外のプロジェクトでは、ロボットに実験を担わせ、大量のデータをAIに学習させるというアプローチでした。しかし、水電解をはじめとした電気化学実験は、わずかな不純物の混入や実験条件の違いが結果に影響を及ぼすきわめてシビアなものです。一つ一つの実験工程は難しいものではないにせよ、誰も解を知らない未完成の研究領域では、実験条件が最適化されていない場合がほとんどです。そうしたなかで、ロボットを使って信頼性の高いデータを取得するのは困難で、ロボットの長所を活かせません。そこで我々は、研究者が厳密な実験を行い、高精度かつ信頼性の高い実験データをAIに学習させる戦略をとりました。そのことが、少量のデータであっても、短期間で成果をあげることができた一番の理由であると考えています」(坂牛)

今後、坂牛らは、ただ新しい電極触媒

を発見するのみならず、なぜ高性能なのかについてもAIを活用して解明を進め、未解明の部分が多い電解触媒に関する学理を構築していきたいと考えている。

“天気予報の手法”で電極触媒の「寿命予測」を迅速に

人間による精緻な高信頼性実験とデータ駆動型手法との相乗効果で研究を加速する、という坂牛らの戦略は、電極触媒の新材料探索だけでなく、寿命予測においても効力を発揮している。

水電解装置の導入に向けては、電極触媒の寿命、すなわち劣化の予測が不可欠だ。しかし、それを精度よく予測するためには、水電解装置を数千時間から、場合によっては数年間にわたって運転させ続けなければならない。

そこで坂牛らは、電極触媒の劣化を短時間で正確に予測するためのアルゴリズム開

発に取り組んでいる。

アルゴリズム開発に先立ち、坂牛らは過去70年間の電解技術に関する論文を徹底的に調べ、劣化の主要因は、電極の溶出によるものと推察。まずは電極が溶出する様子を再現するシンプルな数理モデルを構築した。

この数理モデルの予測結果と、実際の劣化試験の実験データとを比較してみると、最初の数時間はほぼ合致した。しかし、時間が経つにつれて、実験データと予測との間には、徐々にずれが生じていく。

そこで、導入したのが「データ同化」と呼ばれる手法だ。データ同化とは、数理モデルの予測値に対し、逐次、実測値を取り込み、確率論に基づいて数理モデルのパラメータを最適化していく手法のこと。大規模で実験による検証が困難な現象の予測に活用されている手法であり、特に、近年の天気予報の精度向上は、データ同化によるところが大きい。

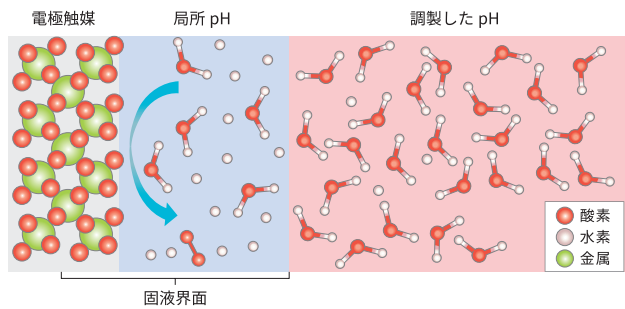


図2 O₂発生反応における電極界面の挙動

「分光電気化学測定装置」では、電極に電流を与えて電位の応答を調べると同時に、電極に光を照射。そのスペクトル変化から、電極表面についた物質を特定し、その挙動を調べることができる。

「今回、我々の数理モデルに対するデータ同化の導入には、計算科学の専門家である石井秋光研究員（計算組織設計グループ）の協力を得ました。約 900 時間分の劣化試験によって我々が取得したデータをもとに、どのような計算式を用いるのが適切か、ともに検討を重ねていきました」（坂牛）

その結果、劣化試験開始から 300 時間の実験データだけで、900 時間後の触媒の劣化を、96%の精度で予測できるアルゴリズムが完成した（図1）。

「試験時間を約3分の1に短縮できたことは、開発材料の実用性を迅速に判断するために有用です。とはいえ、今回はラボ内の簡易的な機器による劣化試験であり、実際の水素電解装置ではもっと複雑な要因が絡み合っ劣化が進みます。今後は、より実際の水電解装置に近い条件で電極触媒の寿命予測ができるよう、アルゴリズムを発展させていく計画です」（坂牛）

電極触媒の活性に影響を及ぼす「局所pH」に着目

加えて、寿命予測アルゴリズムの精度を

より一層高めるために、坂牛らは未解明の現象の理解にも取り組んでいる。その一つが、電解液の pH の変化と触媒活性との関係である。

「触媒反応が進むにつれて電極近傍の電解液の pH（局所 pH）は変化し、触媒の活性はその影響を大きく受けることが知られています（図 2）。特に、電解液全体の pH が中性である場合、局所 pH が触媒の活性に強く関与すると言われながらも、電極からわずか数ミクロンの領域の pH を正確に測定するのは難しく、触媒活性との相関は理解が進んでいませんでした」と坂牛。

そこで坂牛らは、モデル触媒として、安定性と評価性に優れたイリジウム酸化物を選定。「回転リングーディスク電極(RRDE)※と呼ばれる電気化学測定装置を使い、酸素発生側の電極界面近傍における局所 pH の変化を高精度に測定した。

その結果、2025 年1月、局所 pH と電解液全体の pH との差の拡大が、触媒の活性に大きな影響を及ぼしていることを突き止めた。さらに、分光電気化学測定 (P.5 写真)と呼ばれる手法を駆使し、水素イオン (H⁺) が電極界面近傍に蓄積することが、

触媒の活性が正確に測定できない原因になっていることを解明した。

「現在、pH の変化を寿命予測モデルに取り入れる方法を検討しています」と次なる展開に意欲を燃やす坂牛。今後、ますますデータ駆動型手法が物質・材料の研究開発にとって重要な役割を果たすことが確実視されるなか、坂牛らは信頼性の高い実験データを生み出す手腕を強みとして、持続可能な社会への道筋を照らしていくに違いない。（文・山田久美）

※回転リングーディスク電極（RRDE）…電極を一定の速度で回転させることで、基盤となる電極材料の拡散を制御しながら生成物や中間体を高精度分析する電気化学測定装置のこと



坂牛 健

Ken Sakaushi

エネルギー・環境材料研究センター
電気化学エネルギー変換チーム
チームリーダー

NIMS-筑波大学連携大学院の教員を務める坂牛の研究チームには、ミャオ・ワンNIMSポスドク研究員（写真奥）に加え、大学院生のパーボンパット・ヨドワットニパット（右）と佐藤世菜（左）も在籍している。「私の研究上の目標は、従来の方法では理解に100年かかっていた電気化学の原理を、AIや数理モデルをうまく利用することによって、5年で達成すること。この5年という期間は、ちょうど大学院の修士・博士課程に相当します。教育者としても、物質・材料とAIの両方に精通した人材の育成に貢献していきます」（坂牛）

水を 素を ためる

磁性体の力を引き出し 水素の液化効率向上を導け

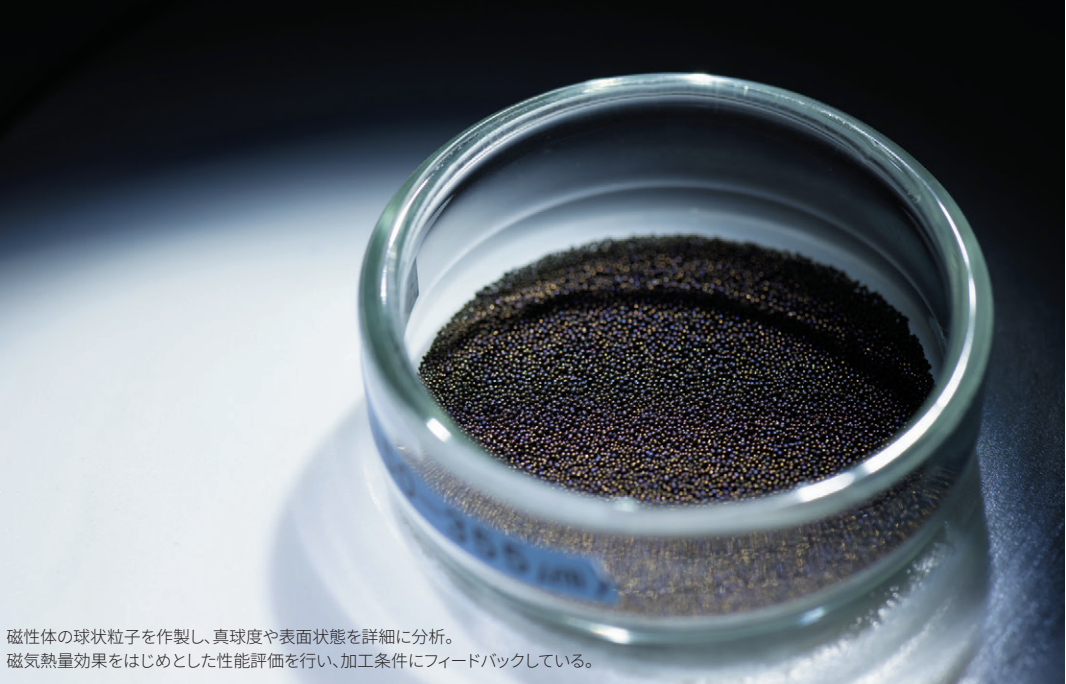
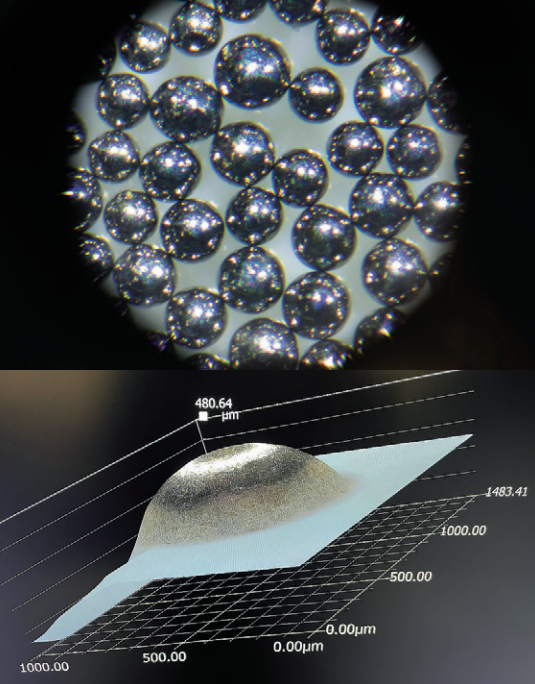
水素を液化し、大量に輸送・貯蔵する手段として NIMSが構築を進める「磁気冷凍システム」。齋藤明子主席研究員ら材料開発グループは、液化効率向上の命運を握る「磁性体」の研究開発に情熱を燃やす。

＼合わせて読みたい／
「磁気冷凍システム」



NIMS NOW
Vol.24 No.1 p12





磁性体の球状粒子を作製し、真球度や表面状態を詳細に分析。
磁気熱量効果をはじめとした性能評価を行い、加工条件にフィードバックしている。

「磁気冷凍システム」の現在地

液体水素の製造に必要なコストやエネルギーを削減する手段として期待を集める「磁気冷凍技術」。磁場をかけると磁性体が吸熱・発熱する現象を利用して、温度をコントロールする技術だ。

水素の液化に必要な冷却温度範囲は、常温～20K（－253℃）までと幅広い。それを磁気冷凍技術により達成するという挑戦的な課題に対し、NIMSは「能動的蓄冷式磁気冷凍（AMR）」と呼ばれる磁気冷凍方式を採用し、システム開発に邁進している。これは、科学技術振興機構（JST）「未来社会創造事業」のもと2018年にスタートしたプロジェクトであり、その動向は本誌でもたびたび紹介してきた。

このプロジェクトでNIMSは、液体窒素を使って77K（－196℃）まで冷やしたあと、「77K～20Kまでの温度領域をAMRで冷却する」という目標を掲げている。2021年には、早くも34K（－239℃）～20Kまでの冷却に成功。世界で初めてAMRによる水素の液化を達成した（P.7下に掲載号紹介）。

残る課題は、77K～34Kまでの温度領域の冷却だ。それに不可欠なのがシステムの改良、そして磁性体の進化である。

冷却効率に直結する 磁性体の“カタチ”

磁気冷凍システムの冷却の心臓部は、

磁性体を充填したシリンダーだ。シリンダー内を熱交換流体（冷媒ガス）が行き来し、磁性体の発した熱を運ぶ（図1）。プロジェクトにおいて材料開発グループを率いる齋藤は、磁性体の課題についてこう語る。

「磁気冷凍用の磁性体にとって最も重要な指標は、『磁気熱量効果』です。これが大きいほど、一度に大きな温度変化を生じるため、効率的な冷却が可能になります。ただ、磁性体の種類によって磁気熱量効果のピークは異なり、77K～20Kまでの幅広い温度領域を1種類の磁性体でカバーするのは不可能です。そこで、シリンダー内に複数種類の磁性体を並べ、バケツリレーのようにして段階的に温度を下げていく戦略を考えています」（齋藤）

大きな磁気熱量効果を示す磁性体として代表的なものが、重希土類の金属間化合物だ。ガドリニウム（Gd）、ホルミウム（Ho）、エルビウム（Er）などを含む磁性

体が有望視されており、一見すると77K～20Kの温度領域はそれらでカバーできそうにも思える（図2）。

しかし、話はそう簡単ではない。シリンダー内で熱を効率的に運ぶためには、磁性体から熱交換流体へと熱が瞬時に伝達されながらも、磁性体間の熱伝導は抑制的であるという、一見矛盾する熱制御を実現しなければならない。その解決策となり得るのが、磁性体の“カタチ”だ。

「磁性体を球状に加工することにより、磁性体と流体の接触面積が増えて熱交換が円滑化する一方で、磁性体同士は点接触になり、熱伝導が抑制できます。さらに、熱交換流体の流路も考慮して、磁性体の要件を『真球度が高く、粒径が約0.3ミリの、表面がなめらかな粒子』と決めました。磁性体によって最適な加工条件は異なりますから、それぞれの物質に最適な条件を、実験を通して探っているところです」（齋藤）

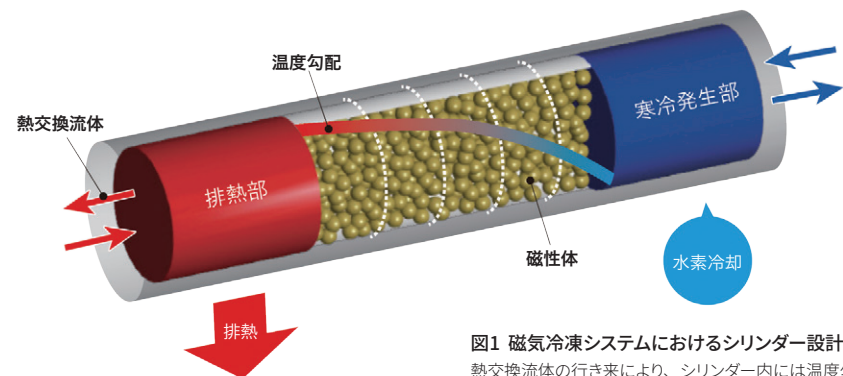


図1 磁気冷凍システムにおけるシリンダー設計
熱交換流体の行き来により、シリンダー内には温度勾配が生じる。効率的に冷却するため、各温度領域で優れた冷却能力を発揮する磁性体を複数種類並べる方法が考えられる（白点線）。

磁性体の個性に応じた 加工方法の探索

金属を球状に加工する技術として産業プロセスでも多用されている方法が、溶かした母材を高圧ガスで吹き飛ばすことにより細分化して球状にする「フリーフォール・ガスアトマイズ法」だ。量産性が高く、既存装置が活用できるというメリットがある。材料開発グループでは、NIMS内に「フリーフォール・ガスアトマイズ装置」を導入し、ホルミウムアルミニウム（ HoAl_2 ）やエルビウムコバルト（ ErCo_2 ）の粒子化に成功してきた。ほかにも、 ErCo_2 の真球度を高めるために、磁性体を溶かして高速回転するディスクの上に垂らし、遠心力で飛ばすことにより細分化して粒子をつくる「回転ディスク法」を適用するなど、さまざまな加工方法を試行している（図3）。

「加工方法によって、母材の溶解温度が異なりますから、磁性体の融点が加工方法の選定基準となります。また、母材の溶融にるつぼを用いるものと、用いないものがありますが、希土類を含む金属間化合物の場合、るつぼとの反応性が高いものが多いため、注意を要します。ほかにも、高速回転によって材料にかかる遠心力や、急激な熱衝撃に対する脆弱性も考慮しなければなりません。たとえ理想的な形状に加工できた場合でも、得られた粒子の性質が母材から変化してしまうケースもあり、一筋縄ではいきませんが、製造した粒子の磁気熱量効果に加えて、真球度や表面の状態を詳細に分析し、独自の加工方法の開拓も進めています」（齋藤）

一例として、齋藤らはこれまでナノ粒子の合成に特化していた「熱プラズマ法」を使ってサブミクロン級の粒子を作製するため、装置メーカーとともに「高周波誘導熱プラズマ装置」をつくり上げた（P.7写真）。

「熱プラズマは、太陽表面に近い約6000℃もの高温になるため、融点が高い化合物をも溶解することができます。私たちはこの装置を用いて、融点が約2200℃と非常に高いことから質の高い粒子を得ることが難しかった二ホウ化ホルミニウム（ HoB_2 ）の加工に取り組み、真球度の高

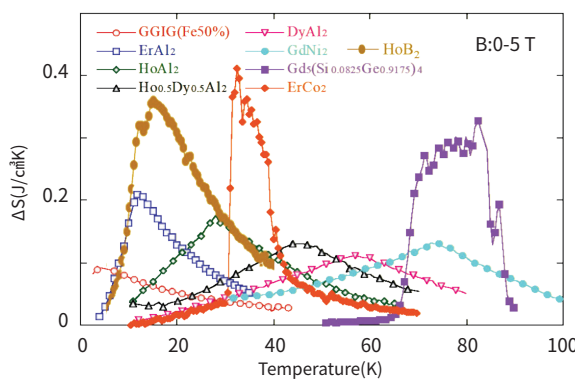


図2 磁気冷凍による水素の液化に有望な重希土類の金属間化合物
縦軸は、磁場の変化によって生じる磁気エントロピーの変化量。横軸は、温度条件。グラフのピークが高ければ高いほど、一度に冷却できる能力が高く、横に広がりをもつほど、カバー可能な温度領域が広いことを表している。

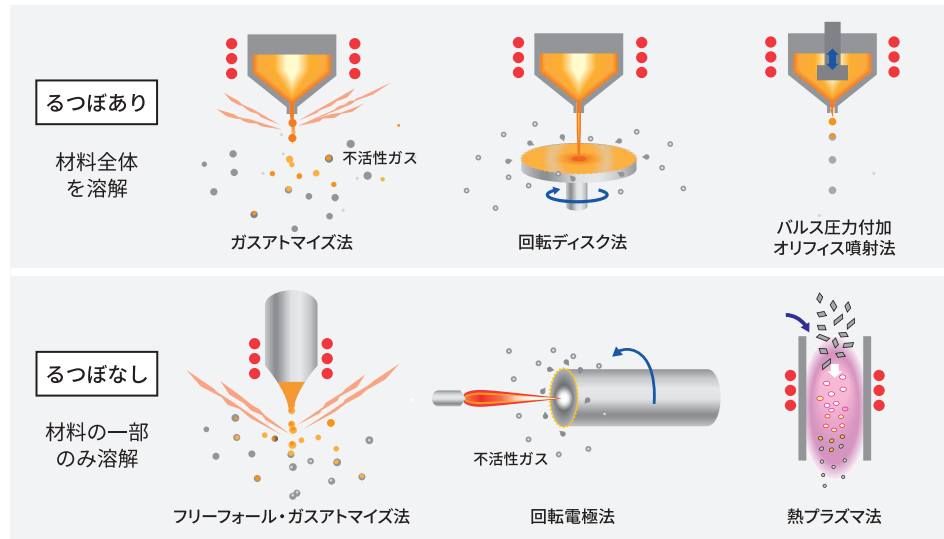


図3 球状粒子の作製法

い粒子を作製することに成功しました。現時点で、一度に作製できる粒子は数グラム程度ですが、実用化を見据えて数キロ単位の量産が可能になるよう、装置の改良も進めています。また、 HoAl_2 に関しても、ガスアトマイズ法を使うよりも、熱プラズマ法を使う方が、粒径のそろった、より真球に近い粒子をつくることできることを確認しています」（齋藤）

他方、磁性体の耐水素脆性や強度は、磁気冷凍システムの寿命を左右する。齋藤らは、それらの向上を目指し、磁性体をコーティングする技術の開発も進めている。応用をまっすぐに見据えたプロジェクトであるからこそ、考慮せねばならない課題は多岐にわたるが、齋藤はそこに大きなやりがいを感じているという。

「2018年にスタートしたプロジェクトは2028年で終了します。それまでに77K～20Kまでの冷却という大目標を達成するためには、システム開発者と私たち材料開発者との緊密な連携が欠かせません

が、それらを一気に通貫で進められることはNIMSの強みです。磁性体粒子一つ一つはとても小さなものですが、そこには計り知れないパワーが備わっています。この強力な“こびとたち”が水素社会を支える働き手となったなら、材料開発者としてこれほど喜ばしいことはありません」（齋藤）（文・山田久美）



齋藤 明子

Akiko Saito

磁性・スピントロニクス材料研究センター
グリーン磁性材料グループ
主席研究員

「水素脆性」の克服を目指して

破壊のメカニズムを徹底解析

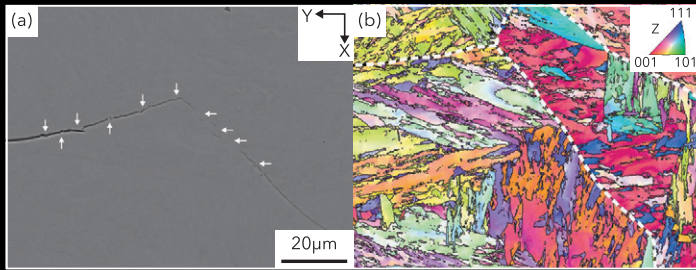


図1 水素を導入したマルテンサイト鋼に生じた亀裂のSEM像 (a) と、それに対応するEBSD結晶方位マップ (b)。亀裂は粒界に沿って伝播 (粒界破壊) していることが確認できるが、頻繁に粒界を逸脱 (aの白矢印) しており、亀裂の伝搬が停止している箇所も複数あった。

(図1・2共に) Akinobu Shibata et al., Corrosion Science vol.233, 112092 (2024).
DOI:10.1016/j.corsci.2024.112092

金属の「水素脆性」という弱点

金属材料には、水素が内部に侵入すると引張強度などの機械的特性が著しく低下する「水素脆性」という弱点がある。一般的な脆性破壊とは異なり、そのメカニズムは複雑だ。しかも、金属の強度が高くなるのに従って、より低い水素濃度で破壊が起きやすくなる。現在、自動車に広く使われている鉄鋼板の2倍近くに相当する、1.5ギガパスカルの引張強度を有する超高強度鋼の開発が進められているが、その強度の鉄鋼では、大気中の水素濃度でも破断が起きる危険をはらんでいる。

鉄鋼材料を対象に、水素脆性をはじめとした脆性破壊のメカニズムを研究している柴田暁伸は、研究の狙いについてこう語る。「水素インフラ材料の選択肢を広げるためには、水素の影響で起こる脆性破壊メカニズムを解明する必要があります。特に、強

度が高い鉄鋼のほとんどは、『マルテンサイト』と呼ばれる結晶組織で構成されています。ですから、まずはマルテンサイト鋼をターゲットとして研究を進め、その知見にもとづいて、耐水素脆性を有する材料の設計指針を打ち出そうとしています」(柴田)

亀裂の伝搬を食い止める

鉄鋼の脆性破壊を一筋に追究してきた柴田の強みは、結晶組織をさまざまなスケール・観点から検証する「マルチスケール解析」の綿密さだ。組織を2次元観察する「走査型電子顕微鏡 (SEM) 」*1や「走査透過型電子顕微鏡 (STEM) 」*2をはじめ、ミクロスケールの3次元観察手法として「X線コンピュータモグラフィ (X線CT) 」*3や「FIB-SEM シリアルセクションング」*4、「電子後方散乱回折法 (EBSD) 」*5といった手法を使い分け、多角的な解析を進めている。

その一例が、マルテンサイト鋼の組織内部で進展した亀裂の挙動解析だ。柴田は水素を導入したマルテンサイト鋼に荷重をかけ、亀裂を発生させた試料を作製。組織内で起こる現象を観察していった。

そのなかで、特に柴田が着目したのが、X線CTで取得した亀裂断面の画像に現れた、“亀裂が途切れた部分”だ (P.3右下図の黄色矢印)。亀裂が伝搬するなかでも、破断に至らなかった箇所が点在していた。その近傍の微細構造にこそ、鉄鋼の耐水素脆性を高めるヒントがあると考えた柴田は、より詳細な観察を重ねた。

「SEMによる2次元観察では、亀裂は粒界に沿って伝播 (粒界破壊) している一方で、頻繁に粒界から逸脱している様子が見てとれました (図1)。FIB-SEMで亀裂を3次元的に観察した結果からも、粒界からの逸脱が頻繁に起きていることは明らかでした (図2)。つまり、この現象が破壊エネルギー

を吸収し、亀裂の伝播を抑制していたと考えられます」

では、亀裂の逸脱が起こりやすい粒界の条件とは何か。柴田はFIB-SEMとEBSDを用いて、いくつもの粒界を対象に、結晶の向き (方位) の解析を地道に繰り返していった。その末にたどり着いたのが「隣り合った結晶粒の方位差が小さい粒界である」という結論だった (図3)。

「これらの結果は、鉄鋼の耐水素脆性を高める方法として、結晶の方位差が少ない組織をつくり込めばいい、という一つの可能性を示唆するものです。少なくとも、水素による脆性破壊には、マルテンサイト鋼の粒界の性格が大きく影響しているという、意義深い知見が得られました」(柴田)

微細組織の美しさに魅せられて

「次のステップでは解析の精度をさらに

0 μm

10

20

30

40

50

60

50

40

30

20

10

0

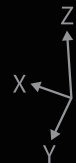


図2 亀裂の3次元形態を再構築したFIB-SEM像。青色は粒界破壊が起こった箇所、赤色は亀裂が粒界から逸脱した箇所を表わしている。

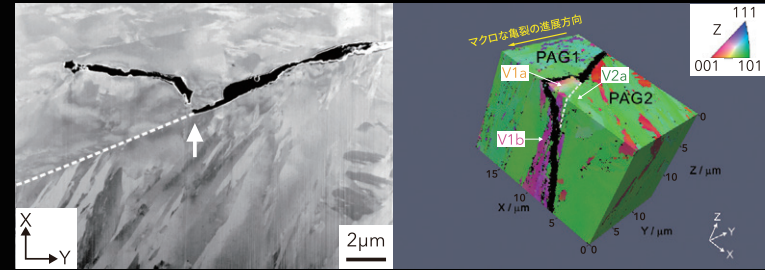


図3 亀裂が粒界から逸脱した箇所 (結晶粒 V1a と V2a が隣り合う粒界) の結晶方位を、FIB-SEM で詳細に解析した。その結果、結晶粒 V1a と V2a の方位差は 10.81 度と、きわめて小さかった。

Akinobu Shibata et al., International Journal of Hydrogen Energy vol.48, 34565-34574 (2023).
DOI:10.1016/j.ijhydene.2023.05.211

高めるとともに、体積が大きなモデルの3次元解析を実現したい」という柴田。

「鉄鋼の粒界が水素脆性に影響していることはわかりました。しかし、亀裂が粒界を伝播している瞬間、そこに水素がどう影響しているのかまでは明らかになっていません。そのためにも、水素による脆性破壊と水素以外で起きる脆性破壊とを比較するといった方法で、水素の関与をより明確化していきたいと思っています」(柴田)

柴田は自身を「マルテンサイト鋼のマニア」だという。マルテンサイト鋼の組織の美しさに魅せられ、ここまで研究を重ねてきた。「複雑で美しい構造の理論的な背景を理解したうえで、その構造と機能を制御できるようになりたいのです」と心から楽しそうに語る。

水素インフラに限らず、世の中には鉄鋼材料の活躍の場があふれている。水素脆性研究をきっかけとして、さまざまな脆性

を克服した次世代高強度鋼への道が拓けるはずだ。

(文・牛島美笛)

*1 走査型電子顕微鏡 (SEM) …細く絞った電子ビームで試料表面を走査。試料から放出される二次電子や反射電子を検出することで、微細な表面構造や組成コントラストを観察する装置。

*2 走査透過型電子顕微鏡 (STEM) …細く絞った電子ビームで試料を走査。透過・散乱した電子を検出することで、試料内部の原子配列や構造などを観察する装置。

*3 X線コンピュータモグラフィ (X線CT) …試料を回転させながらX線を照射し、さまざまな角度からのX線透過像を取得。これを組み合わせて3D透過像を再構築する手法。

*4 FIB-SEM シリアルセクションング…試料上方から、集束イオンビーム (FIB) で原子1層ずつスライスするように削ると同時に、SEM観察を行い、2D画像を取得。これを重ねることによって3D画像を再構築する手法。

*5 電子後方散乱回折法 (EBSD) …SEMにおいて、試料に照射した電子の拡散を反射電子回折パターンとして取り込むことにより、結晶方位や結晶構造を3D解析する手法。

水素をつかう

水素燃料で火力発電をクリーンに。 金属3Dプリンタでタービン開発に革新をもたらす

火力発電の燃料を、化石燃料から水素へ転換しようという動きが加速している。しかし、水素を高効率に燃焼させるためにはタービンの構造が複雑になる。長田俊郎 グループリーダーと草野正大 主席研究員は、金属3Dプリンタや特性予測プログラムを使い、課題解決を目指している。

燃焼の制御が難しい水素

火力発電は、世界の電力生産の主力だ。その燃料の大半は、天然ガスなどの化石燃料である。化石燃料を燃やして得た熱エネルギーを使ってガスタービンを回し、電力を生み出している。火力発電には、天候や昼夜を問わず電力を安定供給できるという大きなメリットがある一方で、二酸化炭素(CO₂)の排出という問題がある。

そこで、火力発電の燃料を、燃焼させてもCO₂を排出しない水素に置き換えることにより、電力の安定供給と持続可能性を両立させようという構想がある。その実現に必要なものが「水素ガスタービン」だ。

水素ガスタービンは、既存のガスタービンの「燃焼器」を置き換えるだけでよく、一から設備を整備するよりもはるかに導入が容易だ。とはいえ、水素燃料用の燃焼器の製造には、技術的な課題がある。NIMSで火力発電用タービンや航空機のジェットエンジンの高効率化を目指し、耐熱材料の研

究開発を進めている長田俊郎は次のように説明する。

「水素を燃料とする場合、まず、タービン内の『圧縮機』で空気を圧縮し、500℃～700℃程度に高温化させたあと、高温の空気と水素とをしっかりと混合しうえて、『燃焼器』で均一に燃焼させる必要があります。ただ、水素は燃焼温度が高く、その制御が難しい燃料です。燃焼器内部での燃焼温度にムラがあると、高温化した箇所で、環境負荷の高い窒素酸化物(NO_x)が発生してしまいます。燃焼温度を均一化するために、燃焼器の内部構造は、従来のガスタービンに比べて非常に複雑になります。内部構造が複雑になるほど、製造コストがかさむのはもちろん、従来の精密鑄造や鍛造といった方法での製造が難しくなるのです」(長田)

その打開策として、長田が中心となり推進している研究テーマが、金属3Dプリンタを使った超耐熱合金(超合金)の複雑造形技術の確立だ。

3Dプリンタによるタービン製造の第一歩、結晶の欠陥形成を抑制

高温・高圧という過酷な環境にさらされるタービン部品には、高度な信頼性が求められる。現在、火力発電用タービンの高温部には、ニッケルベースの超合金(Ni基超合金)が使われている。1000℃を超える高温下での強度や耐食性に優れ、宇宙航空分野でも使用されている。しかし、その信頼性が担保されるのは、精密鑄造や鍛造といった従来の製造法であればこそ。長い歴史をもつ従来法に対し、歴史の浅い3Dプリンタによる積層造形は、結晶組織の制御の仕方が確立されていない。「そこで、私が推進する研究テーマでは、3DプリンタによるNi基超合金の組織制御と、耐水素性に優れる超合金の設計、この2つを軸に展開しています」(長田) 研究テーマのうち、積層造形を担当するのが草野正大だ。草野は、Ni基超合金について「割れなどの欠陥が生じやすく、積層

造形が非常に難しい材料」と話す。

金属の積層造形方式として代表的なのが、粒径が数十マイクロメートルの金属粉末にレーザを照射し、粉末を溶融・急冷凝固させる工程を何度も繰り返す「レーザ粉末床溶融結合法(L-PBF)」だ。草野は2016年から、L-PBFの研究に着手。機械学習やシミュレーションも駆使して、レーザの照射条件(出力や走査速度など)と金属の結晶組織との相関解明を進めている(NIMS NOW Vol.23 No.5 P.8 参照)。「まずは、レーザの照射条件とNi基超合金の欠陥との関連性を検証しようと、試験体の作製に取り組みました。使用した原料は、Ni基超合金のなかでも造形が難しいとされる『インコネル 738LC』の粉体です。照射条件ごとに10ミリメートル立方の試験体をつくり、光学顕微鏡で欠陥の有無を観察していきました(右上写真)。その結果、約100通りのレーザの照射条件を試した中に、欠陥が生じていないきれいな試験体を発見したのです。着手して早々、有望なレーザの照射条件が発見できたのは、一度に数十通りの条件を試せる3Dプリンタならではの効率性が活かされたとも言えるでしょう。現在は、なぜ欠陥が生じなかったのか、メカニズムの解明を進めています」(草野)

それと並行して、草野が作製した欠陥のない試験体はNIMSの材料試験の専門家によって、機械的特性の評価が進められている。高温環境下での引張試験*1では、従来の精密鑄造と同等かそれ以上の強度を有していることが確認できており、現在はクリープ試験*2や高温水素環境試験などを実施中だ。

超合金の「特性予測プログラム」も整備

前述の試験体の作製では、L-PBFの基礎的な技術の確立を目的に、既存のNi基超合金を原料に用いたが、高温・高圧の水素ガスというこれまで以上に過酷な環境下では、機械的特性や耐水素脆性に優れる、新たな超合金が求められている。

Ni基超合金の機械的特性は、元素の組成に加え、結晶組織が左右する。組成・組織の組み合わせは無数にあり、すべてを

実験で検証することは現実的ではない。

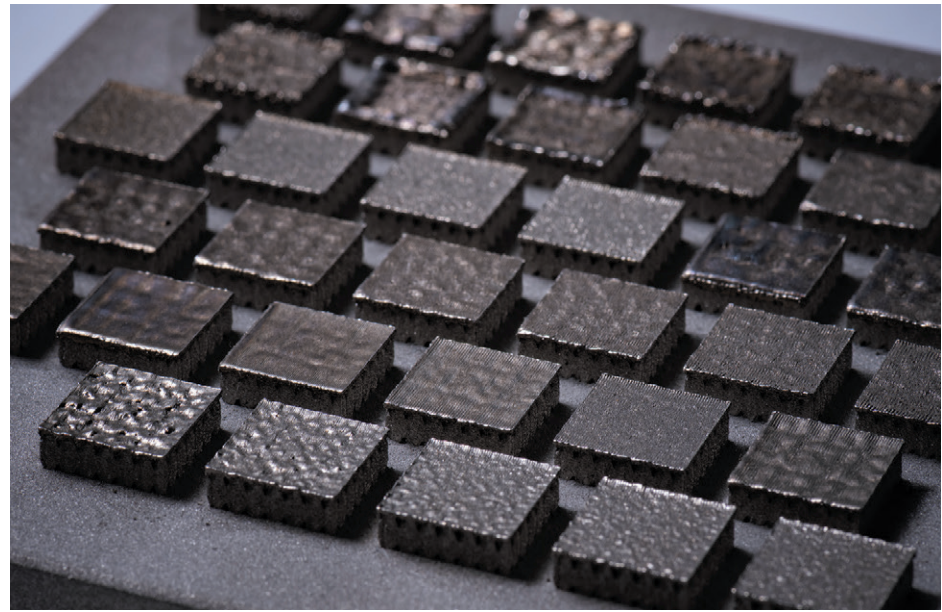
長田は2022年、金属の結晶組織からその特性を高速で予測する「NIMS特性予測プログラム」を開発した。組成や組織、使用条件を与えれば、さまざまな機械的特性を予測することが可能だ。仮想実験を行うことで開発スピードを飛躍的に加速できる。「このプログラムの活用によって、燃焼器として超合金に求められる組成や組織を逆算することもできます。今後は、プログラムが提示する最適な組織を3Dプリンタでも作製できるよう、草野さんの知見と融合していきたいと考えています。また、3Dプリンタの製造プロセスは、従来の精密鑄造とまったく異なりますから、たとえ特性予測プログラムが提示する結晶組織を精密鑄造でつくるのが難しい場合でも、3Dプリンタならつくれる可能性もあります。その点からも、3Dプリンタには大きな可能性を感じています」と長田。草野もこうつづける。

「高温の中で高速回転するタービンのブレード(翼)には、先端には高いクリープ強度が、根元には高い疲労強度が必要です。金属3Dプリンタは、部位ごとに求められる特性をレーザ照射条件で調整できると考えています。これも金属3Dプリンタならではの強みといえます」(草野)

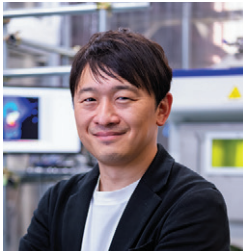
現在は、火力発電用タービン向けの超合金の研究開発を進めているが、今後、水素を燃料とする航空機エンジンの研究にも展開していくという。長田による超合金の設計と、草野による金属3Dプリンタの条件最適化。両者の挑戦が融合したその先に、水素社会の到来を期待したい。(文・山田久美)

*1 引張試験…試験片を一軸方向に所定の速度で引っ張り、破断するまでの試験片の伸びとそれに要する力を測定する試験。

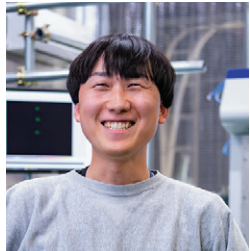
*2 クリープ試験…高温状態にした材料の試験片を両側から一定の力で引っ張ったとき、変形の大きさや破断までの時間を測定する試験。



L-PBFを用いて作製した、Ni基超合金の積層造形材。一つの基板上に、レーザの照射条件の異なる試験体を30種類以上つくり、欠陥形成を抑制できるレーザーの照射条件を探索した。



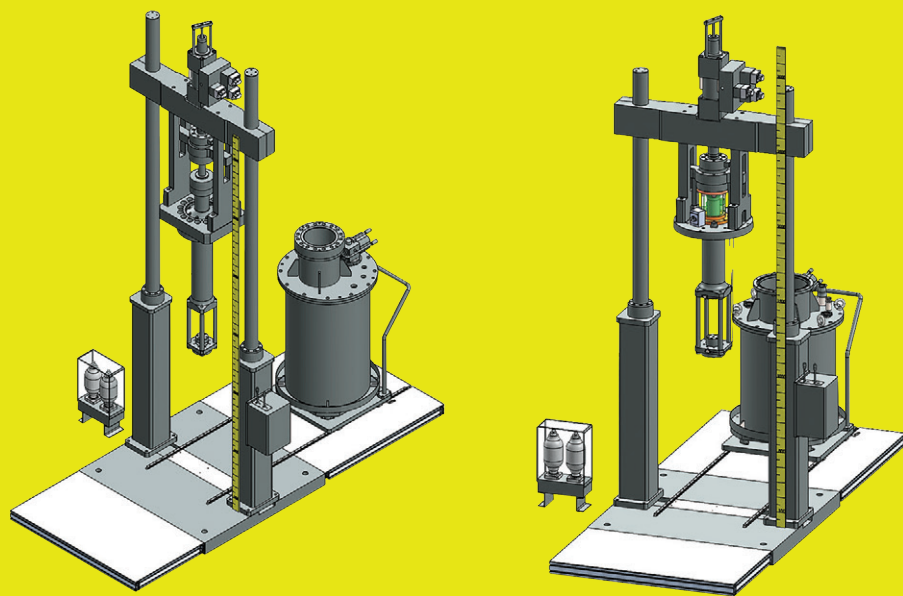
長田 俊郎
Toshio Osada
構造材料研究センター
高信頼性耐熱材料グループ
グループリーダー



草野 正大
Masahiro Kusano
構造材料研究センター
積層材料グループ
主任研究員

水素インフラの安心・安全を守る実地試験

「水素環境下材料試験」大解剖



高圧極低温引張/疲労試験機

圧力：大気圧 (0.1 MPa) ～ 10 MPa
温度：20 K ～ 353 K
環境：水素ガス、ヘリウムガス

中空極低温疲労試験機

☆中空試験片を使用した高圧下試験が可能 (P.15右下に試験条件)
〈通常の試験片を用いた場合〉
圧力：大気圧 (0.1 MPa)
温度：20 K ～ 353 K
環境：液化水素、水素ガス、ヘリウムガス

水素に強い金属を求めて

海外のメガソーラーで発電した電力を使って水を電気分解し、大量の水素を製造。それを液化して、専用の運搬船で日本国内に輸入する——そんな液化水素を主役とした水素サプライチェーンの実現を目指し、産官学が一丸となっている。その名も「大規模水素サプライチェーン構築プロジェクト」*。新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) が運営・管理する課題で、NIMS も参画機関に名を連ねている。

プロジェクトにおける NIMS の役割は、液化水素インフラで使用される構造材料の特性を評価するための試験設備を整備することだ。現時点では、過酷な水素環境下で使うことができる材料は限られている。というのも、水素の液化温度は 20 K (約

－ 253℃) もの極低温。一般的に、金属材料は低温になるほど、ねばり強さ (延性) が低くなる傾向がある。しかも、高強度の金属材料ほど、水素ガスの影響を受けやすく、延性が低下してしまう。

そこで、低温水素環境下で、できるだけ安価で耐久性のある材料を安心して使えるようにしていくために、NIMS は 2024 年 10 月に「水素環境材料実験棟」の運用を開始した。

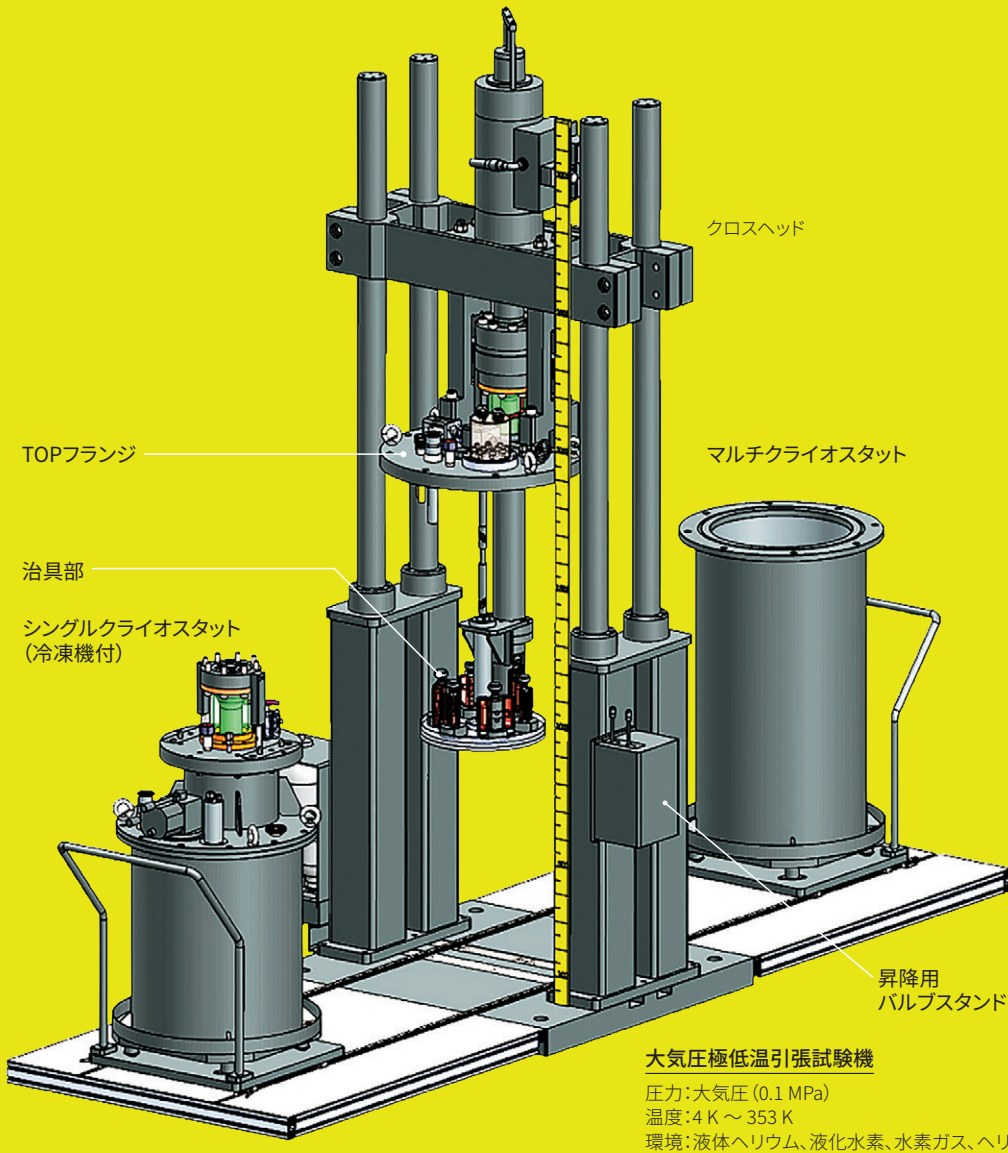
世界初の温度・圧力領域をカバー

本実験棟には、材料の機械的特性 (引張強度、疲労強度、破壊靱性) を水素環境下で評価できる各種試験機を取り揃えている。それぞれ試験時の環境条件として、温度と圧力を設定できる (上図)。試験機

は防爆仕様の実験室に設置されており、約 2 万 4000 リットルの液化水素貯槽を備える。

本実験棟の運用を主導する、極限環境材料データユニットの小野嘉則はこう語る。「液化水素のサプライチェーンの商用化実証が進むなかで、材料に求められる温度と圧力の領域が広がっており、従来の試験設備ではそれに対応できません。本実験棟では、世界初の温度・圧力領域を含む、20 K ～ 353 K (80℃) の温度領域、かつ大気圧 (0.1 MPa) ～ 10 MPa 以下の高圧領域で機械的特性データを取得できるようになりました (P.15 右上図)」

現在は、2026 年度からの本格的なデータ取得に向け、運用技術の確立を目指している段階だ。小野は、NIMS が水素環境材料実験棟の整備に名乗りを上げた理



大気圧極低温引張試験機

圧力：大気圧 (0.1 MPa)
温度：4 K ～ 353 K
環境：液体ヘリウム、液化水素、水素ガス、ヘリウムガス

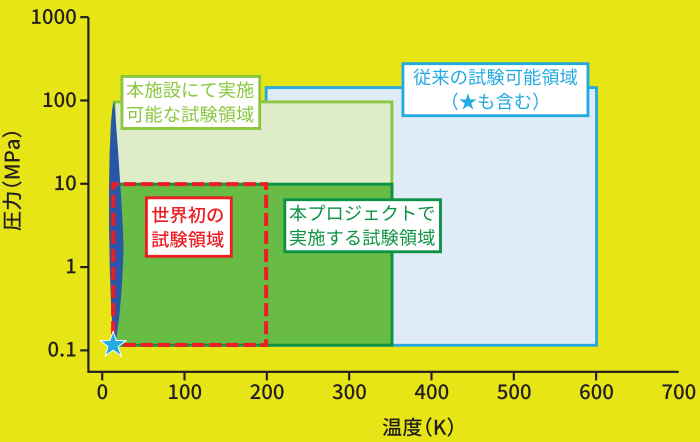
由をこう語る。

「我々の先輩方は、1970 年代後半から極低温環境下での材料の力学特性評価に関する研究を行ってきました。それを引き継いだ我々は、液化水素や液化酸素を燃料とするロケットエンジン材料の極低温試験も進めてきました。そのなかで培ってきた技術や知識が生かせると考えたのです」

試験を格段に簡便にする
試験片を貫く“孔”

極低温試験で培われた知見は、水素環境下試験でも確実に生きている。その一例が「中空試験片方式」だ。

「通常の水素環境下試験機は、試験片の周りを高圧水素ガスで満たすために大掛かりな装置を要し、装置の導入と維持に



日本国内で実施可能な水素環境下試験

日本国内には、液化水素環境下での材料の機械的特性を評価する試験機が1基だけ存在するが、温度と圧力の領域が限定的だ (図中★印)。今回、評価可能な領域を大幅に拡張した。

高額の費用がかかります。そうした負担を軽減する目的で活用を思い立ったのが、極低温試験の折に緒形俊夫 NIMS 名誉研究員が開発した『中空試験片』です (写真)。この試験片は、真ん中に細い孔があいており、極低温試験ではそこにセンサを仕込んで、力学試験中の材料の温度変化を測定していました。一方、水素環境下試験では、その孔に水素を流し込み、試験片の内部に水素環境を再現しています。この方式によって装置は大幅に簡略化でき、水素ガスも少量で済みます」 (小野)

緒形と小野は水素ステーションなどでの材料利用を念頭に、温度範囲は -45℃～室温、圧力は 105MPa という条件のもと、中空試験片を使った引張試験を実施。従来の試験方式とほぼ同等のデータを得られることを確認している。また、2024 年には同試験方式の規格化にも成功した。小野らは引き続き、液化水素インフラで材料がさらされる低温・高圧領域でも、中空試験片による引張試験や疲労試験を実施していく計画だ。

水素社会で使用可能な材料の
拡大を目指して

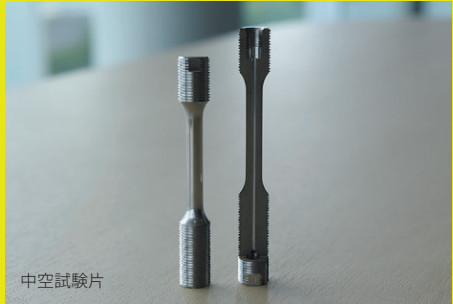
「現在、民間企業主導で、液化水素を含む低温水素環境下で使用できる材料を増

やすための動きが出てきています。これを実現していくためには、信頼性の高い特性データが不可欠です。我々はその点でも貢献できると考えています」 (小野)

小野らは、まずは水素環境下におけるオーステナイト系ステンレス鋼 (SUS316L) とアルミニウム合金 (A5083-O) の機械的特性データの取得を進めるとともに、将来的にはそれらデータを、NIMS が運用するデータベースを通じて公開していくという。長年の実績をもつ NIMS の材料試験は、時代の要請に応え、新たな歴史を刻みはじめた。

(文・山田久美)

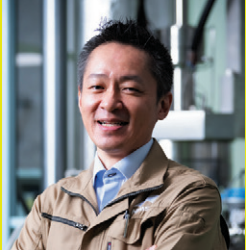
*大規模水素サプライチェーン構築プロジェクト…NEDOが推進する「グリーンイノベーション基金」の一課題。



中央を貫く細い孔に高圧ガスを流す、NIMS独自の「中空試験片方式」により、以下の条件で試験可能。

〈中空試験片を用いた場合〉

圧力：中空内は最大120 MPa
温度：20 K ～ 353 K
環境：中空内は水素ガス、外側はヘリウムガス



小野 嘉則

Yoshinori Ono

技術開発・共用部門

材料データプラットフォーム

極限環境材料データユニット

ユニットリーダー

NIMS NOW

Online Edition

待望のWEBマガジン化!

いますぐアクセス!



- ✓ 最新の特集をいち早くお届け!
- ✓ いつでもどこでも、登録不要ですぐ読める
- ✓ 関連する記事やNIMS公式YouTubeの動画にも簡単アクセス
- ✓ 材料科学のトレンドが一望できる
- ✓ ウェブ版だけのスペシャル記事も更新予定
- ✓ 日本語・英語の二言語で公開

最新号だけじゃない
充実のアーカイブ



<https://nimsnow.nims.go.jp>

*ウェブ化に伴い、英語冊子版(NIMS NOW International)の発刊は終了しますが、日本語冊子版は継続して発刊いたします。

第5期中長期計画がスタートした
2023年4月以降の発行号を網羅。
さらに、過去のアーカイブも
順次公開していきます。



NIMS NOW vol.25 No.3 通巻210号 2025年7月発行

国立研究開発法人 物質・材料研究機構

購読申し込みフォーム
下記FAX、E-mailでも承ります。



R200

古紙配合率 60% 再生紙を
使用しています



植物油インキを使用しています

ISSN 2436-3502