

火力発電所の安全性を確保するには、数年おきに発電所を停止し、蒸気タービンなどの機器を検査する必要があります。ただし、発電所の停止は経済的損失が大きいことから、発電所を稼働したまま損傷状況を監視する技術の開発が求められている。電力中央研究所の中村氏は、高温下でも正常に作動する自給型センサ材料を開発。第一原理計算を用いることで、新材料の開発に独自のアプローチで挑んでいる。

## 未来への 高温下での状態監視を実現する センサ用機能材料の開発

高温・高圧の環境下に設置される機器は、経年とともに金属内部にクリープポイドと呼ばれる微小な空孔が発生する。クリープポイドが成長すると亀裂が生じ、機器の破損や破断といった重大事故につながる可能性があるため、火力発電所などの施設では超音波探傷法を使った非破壊検査を定期的に実施し、機器の健全性を評価している。理想をいえば、発電所を稼働したまま機器を監視したいところであるが、既存の超音波探傷子は360℃程度で圧電特性を消失してしまうため、高温下でも圧電特性を失わない材料の開発が必要とされている。

電力中央研究所の中村氏は、高温環境でも動作可能な圧電センサ材料とセンサへ給電する熱電材料の開発に取り組んでいる。高温機器の損傷状況を実時間で監視するシステムの構築に努めている。

「すでに基本的なシステムは組み上がっているのですが、今後は実証試験を重ねて実用化を目指していきたいです。この技術が導入されれば、高温機器の損傷状況

手法が採られる。これに対して中村氏は、全く逆のアプローチで新材料の開発を進めているという。

「原子番号と原子の配列のみから物性を予測する第一原理計算を用いて原子レベルのシミュレーションを行い、新材料を設計しています。具体的には、あらかじめ数値計算で特性を予測し、材料組成や合成条件といった実験範囲を絞り込んでから材料を試作し、実験により期待どおりの特性が得られることを確認する、という手順になります。素材となる元素の割合、温度、圧力を与えれば完成される結晶構造を予測できるので、用途に合わせた材料を短期間で開発できるのがこの手法の強みです。まるで計算機の中で錬金術を行っているような感覚です」。

このような手法はマテリアルズインフォマティクスと呼ばれることで、近年、バッテリー材料分野などを中心に、多くの研究者の注目を集める開発手法となっている。旧来の手法は手探りの状態から材料の試作、評価を行い、莫大な時間と労力をかけて目的の材料を探し当てる必要があった。一方、完成後の結晶構造から逆行して材料を開発する中村氏の手法は、仕様を満たす材料を短期間で効率よく開発できる手法となる。

## メカニズムから材料特性を制御 未来を切り開く次世代の材料工学

独自のアプローチで新材料の開発に挑む中村氏は、「メカニズムが分かれば材料特性を制御できる」という信念の下、いまま研究開発に勤しんでいる。大学時代はマテリアル工学科に所属し、セラミックスのクリープ変形について研究を進めてきた。

「研究の軸となっているのは数値計算ですが、計算していくと非現実的な結果が導き出される場合

# 叡智

Wisdom for  
the future

電力中央研究所

<http://criepi.denken.or.jp/>

## 第一原理計算で材料特性を予測し、 高温環境用の自給型センサ材料を開発

を24時間365日、連続モニタリングできるように、信頼性の向上と保守コストの削減を同時に実現できます。もちろん、発電所以外の施設にも応用可能です。化学プラントやコンクリート素材の検査など、幅広い用途に活用できる技術になると考えています」

もあります。たとえばタリウムや鉛などの有害元素を含む材料は、理論上は優秀であっても実際には使いにくいものです。必ずしもトップデータを求めるのではなく、実社会で使える材料を作り出すことが大切だと考えています」。

今後の研究については、「現在のシステムは小さなクリープポイドを検出できないため、センサの精度をさらに向上させていく必要があります。同時に余寿命評価の精度を高めて、センシング技術と寿命予測をパッケージングしたシステムを構築していきたいと考えています。もしかすると、研究を進めていくうちに、他に類を見ない全く新しい特性の材料を発見できるかもしれません。材料という視点から夢のある研究を行えることも、この研究の魅力の一つです」と語っている。

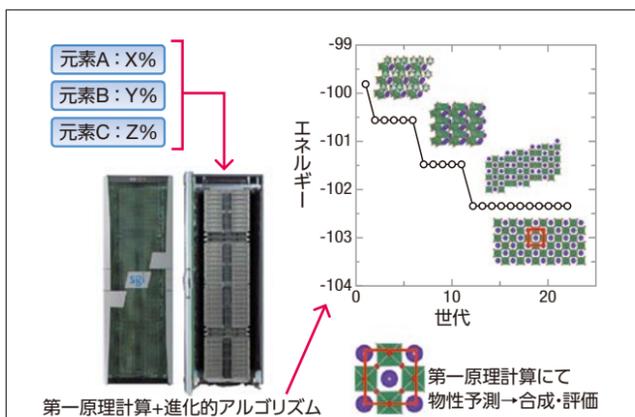
DNA解析が医療研究の在り方を大きく変えたように、材料工学の分野でも新しいアプローチによる研究開発が時代の主流となりつつある。その先駆者の一人として、中村氏の研究には熱い眼差しが注がれている。

### 中村 馨 Kaoru Nakamura

一般財団法人 電力中央研究所 材料科学研究所  
構造材料領域 主任研究員

### 結晶構造から逆行して材料を開発 計算機の中で行う錬金術

通常、新材料の開発は、研究者の勘と経験を頼りに材料を試作し、その特性を評価していく、という



第一原理計算と進化的アルゴリズムを組み合わせ、任意の元素を混ぜた際の安定な結晶構造を予測。