

「水素利用等先導研究開発事業／水電解水素製造技術高度化のための基盤技術研究開発／アルカリ系水電解質及び固体高分子系電解質用酸素発生電極触媒でのマテリアルズインフォマティクスによる材料探索に関する調査研究」に係る仕様書
(2021～2022年度)

国立研究開発法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構
スマートコミュニティ・エネルギーシステム部

1. 件名：

〈大項目〉水素利用等先導研究開発事業

〈中項目〉 水電解水素製造技術高度化のための基盤技術研究開発

〈小項目〉 アルカリ系電解質及び固体高分子系電解質水電解用酸素発生電極触媒でのマテリアルズインフォマティクスによる材料探索に関する調査研究

2. 研究開発の目的及び内容

(1) 事業目的

本事業では、2040年以降という長期的視点を睨み、水素等の「カーボンフリーなエネルギーの新たな選択肢」としての地位を確立させることを目指す。具体的には、再生可能エネルギーからの高効率低コスト水素製造技術、水素の長距離輸送、長時間貯蔵を容易にするためのエネルギーキャリア技術及び大規模水素利用技術の先導的な研究開発に主として取り組み、2030年における水素コスト30円/Nm³を目標とし、化石燃料等の他のエネルギー源と競合できる価格の実現を目指す。

(2) 事業概要

再生可能エネルギーを用いた水電解技術の性能・高耐久化のためには、新たな触媒及び膜材料の開発が必須である。これら材料の開発速度を向上させるためには、材料探索高速化や開発期間の短縮が必要となる。従来の労働集約型の試行錯誤による材料開発では開発速度の高速化は限定であるため、マテリアルズインフォマティクスを用いた材料設計指針の提示に基づく開発が必要である。この中で、水電解槽の性能や耐久性に対して最も影響が大きい材料の一つであるアルカリ系電解質及び固体高分子系電解質中での酸素発生触媒の次世代材料開発について、マテリアルズインフォマティクスの適用性を研究する。

(3) 事業目標

研究開発項目① マテリアルズインフォマティクスによる酸素発生電極触媒の活性と耐久性を最大化するアルゴリズムの調査研究

【中間目標（2021年度）】

2030年における水素コスト低下に向けて重要な、水電解における酸素発生電極触媒の活性と耐久性という二つの目的物性を個別に予測できるモデルを開発し、材料開発期間を短縮することが望まれる。本事業では、アルカリ系電解質及び固体高分子系電解質用の酸素発生電極触媒材料を対象としてマテリアルズインフォマティクスにより二つの目的物性を個別に予測できるモデルについて、燃料電池材料の探索などに用いられている例と比較しながら適用性を検討する。モデル作成に用いる説明変数データについては、NEDO 事業「水素利用等先導研究開発事業／水電解水素製造技術高度化のための基盤技術研究開発／アルカリ水電解及び固体高分子形水電解の高度化」（以下、連携事業）と連携して劣化解析プロトコル開発のアクティビティを活用し、アルカリ水電解については 3d 遷移金属系スピネル酸化物、ペロブスカイト系酸化物および岩塩構造酸化物材料、固体高分子水電解については酸化イリジウム系材料を中心として初期活性、高電位環境、変動電源模擬での活性及び耐久性の定型化した計測データ、材料評価プラットフォームを活用した構造および電子構造データなどの既存データを活用するとともに新たな説明変数データも取得し、データベースの構築に着手する。

この中で、触媒の活性と耐久性の予測に対して重要な説明変数候補を抽出し、連携事業の実験グループにフィードバックする。予測モデル作成のためにデータが充分でない場合は、第一原理計算を含めたコンピュータシミュレーションによるデータ創出を実施する。

【最終目標（2022年度末）】

アルカリ水電解については評価対象をLiFeNi層状酸化物に拡張し、固体高分子水電解については連携事業で得られる新たな実験データを用いて酸化イリジウム系材料の結晶構造、電位の関係を明確化し、構築したデータベースを基にマテリアルズインフォマティクスを活用し、酸素発生電極触媒の活性と耐久性の二つの目的物性の両方を同時に最大化するためのアルゴリズムを研究する。特に、初期触媒活性および劣化の両方の支配因子となる説明変数を3種類以上抽出する。

加えて、膨大な触媒組成を探索できるデータ駆動型手法を用いた材料予測を実施し、材料予測から得られる材料を連携事業に提案する。

また、材料予測から提案された触媒材料を連携事業にて実験評価し、活性と耐久性のそれぞれの支配因子の目的変数への寄与率を確認し、連携事業の実験グループへフィー

ドバックするサイクルでアルゴリズムを検証する。

(4) 事業内容

[2021年度及び2022年度実施項目]

研究開発項目① マテリアルズインフォマティクスによる酸素発生電極触媒の活性と耐久性を最大化するアルゴリズムの調査研究

NEDO事業「水素利用等先導研究開発事業／水電解水素製造技術高度化のための基盤技術研究開発／アルカリ水電解及び固体高分子形水電解の高度化」(以下、連携事業)と連携して収集したデータをライブラリ化し、マテリアルズインフォマティクスを用いた酸素発生電極触媒の活性および耐久性の両方を同時に最大化するアルゴリズムを研究する。

そのプロセスの第一ステップは、触媒活性と耐久性の予測に重要となりうる連携事業の実験グループが取得した既存および新規実験データを、本事業実施者がライブラリ化する。

第二ステップは、本事業実施者が触媒活性と耐久の予測に重要なデータをライブラリから抽出して、連携事業における実験グループと共有し、予測に重要なデータの説明変数について、目的変数に対する確度を分析する。

第一ステップと第二ステップのサイクルを繰り返し、アルゴリズムを構築する。

第三ステップとして、構築したアルゴリズムから触媒活性と耐久の予測に重要なデータの説明変数を抽出し、アルゴリズムから予測される目的変数が良好な値を示す新規材料の組成や構造の最適化指針を導出し、連携事業における実験グループに提案する。その提案に基づき同実験グループが新規材料を合成し、触媒活性と耐久の実験評価データを取得し、そのデータから本事業者がアルゴリズムの精度検証を行うサイクルを繰り返すことにより、アルゴリズムの基盤を構築する。

3. プロジェクトリーダー

本プロジェクトは、国立研究開発法人産業技術総合研究所 関西センター所長代理 栗山 信宏をプロジェクトリーダーとする。

4. 研究委託期間

当機構の指示する日から2023年2月28日まで

5. 成果の取り扱い

(1) 成果の普及

開発された成果を我が国の産業競争力強化に繋げるため、事業者だけでなく、潜在的なユーザー等の意見を聴いて、標準化戦略や成果の市場への受容を促すための安全・性能証明の方策を含む事業化戦略を策定する。

また、途中段階で得られた成果は他の施策と連携しつつ、事業化を図る。

(2) 標準化等との連携

得られた研究開発の成果については、知的基盤整備事業または国際標準化等との連携を図るため、データベースへのデータ提供、標準技術情報（TR）制度への提案等を戦略的かつ積極的に行う。

(3) 知的財産権の取扱い

委託研究開発の成果に関わる知的財産権については、「国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構新エネルギー・産業技術業務方法書」第25条の規定等に基づき、原則として、委託先に帰属させることとする。

また、推進体制を構成する企業等が相互に連携しつつ、研究開発及び事業化を効果的に推進するために、知的財産管理規程等を定めることを求める。

6. 成果報告書（中間年報、成果報告書）の提出

中間年報、成果報告書の電子ファイル一式についてNEDOプロジェクトマネジメントシステム(以下 PMS)を介して、所定の期日までに提出すること。

7. その他重要事項

(1) 連携体制の構築

NEDO事業「水素利用等先導研究開発事業／水電解水素製造技術高度化のための基盤技術研究開発／アルカリ水電解及び固体高分子形水電解の高度化」（連携事業）と連携し、本事業を行うものとする。

連携事業主催の研究推進会議、および拡大研究推進会議に機密保持契約締結の上、連携事業の依頼があれば参加する。

(2) 成果報告会の実施

本研究開発の成果をNEDO主催の成果報告会等で公開する。

(3) PL進捗フォローの開催

PLによる進捗フォロー会議を2回/年開催すること。

(4) PMS を介した各種手続き

PMS の利用申請を行い、PMS を介した実施計画書等のアップロード等の各種手続きに協力すること。

(5) その他

知財推進活動（仕上げたい技術の姿を利用）¹について、NEDOと継続して協議し、技術の優位性、実用化の姿を明確にするとともに、その実現に向け、実施計画に特許出願、論文投稿等の予定目標を記載し、研究を推進すること。

以上

¹実施内容に記載の研究成果について社会実装を想定して技術の優位性を明確化するとともに、知財形成や論文投稿・学会発表など成果の発信に関する計画を具体的に NEDO と協議する活動。