NEDO燃料電池・水素技術開発ロードマップ報告会

NEDO 燃料電池・水素技術開発ロードマップ (FCV・HDV用燃料電池) 40年シナリオ

プレゼンター:辻庸一郎(FC-Cubic)、陣内亮典(豊田中央研究所)、冨中悟史(NIMS) 今井英人(FC-Cubic)、米田雅一(みずほリサーチ&テクノロジーズ)、葛谷孝史(豊田中央研究所)

> NEDO スマートコミュニティ・エネルギーシステム部 燃料電池・水素室 (委託先)みずほリサーチ&テクノロジーズ

①40年シナリオWG 体制



①40年シナリオWG 目的



NEDO・経産省/JST・文科省にも精査頂き、水素分野の中長期的な産官学の研究開発ポートフォリオの参考にして頂く

①40年シナリオWG 目的



①40年シナリオWG ロードマップO/P案

	現在	2030年頃	2040年頃		
I-V要求性能(114)		BOL:0.77V@1.63 A/cm ² EOL:0.72V@1.76 A/cm ²	BOL:0.86V@2.29 A/cm ² EOL:0.81V@2.44 A/cm ²		
作動最高温度 (FC29ック冷却水出口)	90-95℃	105℃	120℃		
耐久性		50,000 h	50,000h		
主要材料目標*1					
Pt目付量	0.17 mg/cm ² (空気極)	0.24 mg/cm ² (空気極0.20 mg/cm ²)	0.14 mg/cm ² (空気極0.12 mg/cm ²)		
空気極触媒質量活性	500 A/g @80°C, 100%RH	1,740 A/g @80°C, 100%RH	39,000 A/g @80°C, 100%RH		
電解質プロトン伝導率	0.106 S/cm @80℃, 80%RH 0.018 S/cm @120℃, 30%RH	0.12 S/cm @80℃, 80%RH 0.032 S/cm @120℃, 30%RH	0.15 S/cm @55℃~125℃, 12%RH		
ガス拡散抵抗	67 s/m @80℃, 80%RH	28 s/m @80°C, 80%RH	26 s/m @80°C, 80%RH		
2040年頃の目 標達成に向けた	5年	5年 5年	5年		
技術開発課題 材料系 <mark>*3</mark> (触媒)	 ①現行原理の極限の貴金属触媒(単原子層、Volcanoの頂点) 加速アイテム:計算による設計、MI、自律実験 ②新奇貴金属活性サイト(ハイブ[*]リット[*]化によるヘテロ界面サイト) ③超低白金(アルカリ雰囲気(局所/大域含む))(単原子/数原子触媒活性サイト) 				
(雷解質材料)	(4)非日金(酸窒化物寺,貢金属に代わる新奇表面別ト)				
	②随伴水を伴わない材料の膜化技術の検討		A学的な理解を軸に分 類、材料種を特定する→ 生産技 ものではない*5		
(触媒層・MEA等)	①触媒層、MEA、GDL、流路形成(セパ・レータ)加	LA装置交換にありるWEB/0F 999			
	②テジカルクエンチ剤 加速アイテム:計算スクリーニング、	MI、自律実験 ・新材料系触媒層、触媒層対応 GDL/セパレー9検討	^{材料触媒層、GDL/t/l[®] ℓ-9最適}		
	DX(各加速アイテム)による材 料・プロセス探索 DX早期活用によ	・新材料MEA製造プロセス検討・新材料MEA製造プロセス検討・新 タ蓄積 よる材料・プロセス探索を推進、DX技術進展に伴いさらに材料・プ	材料MEA量産技術開発 [®] 吐ス探索⇔創生のサイクルを加速		

①40年シナリオWG ロードマップO/P案



②初期性能予測 システム前提(温度・加湿)

7/27



最高作動温度120℃@冷却水出口運転におけるセル冷却水入口(=空気入口)は105℃, 空気入口湿度は12%RH*@105℃と定義 ②初期性能予測 2Dシミュレーション



②初期性能予测 過電圧内訳·材料物性



②触媒活性目標の位置づけ

2040年頃まで, ①現行Pt系触媒の連続的進化と②新原理発見による不連続的進化, 双方の多様なアプローチの参入を可能とするよう, 現行Pt系触媒の極限(Volcano plotの頂点, 最大比表面積)の活性を目標の目安とする.



②電解質の使用環境

動力性能要件では,電解質膜最高温度は123℃.ただし通常走行時の冷却水出口温度70℃(空気極入口温度55℃)での 燃費を担保するため,プロトン伝導率0.15 Scm⁻¹を実現する温度を55~125℃に設定.湿度は12%RH以上とする. 55℃以下の温度に関しては,起動システムに依存するところもあり,以後の検討事項とする.



③材料候補・物性目標設定 考え方

- 1.システム側からの必要条件をもとにロードマップの 軸となる主要材料の整理(他の部材も必要だが検討 開始時期が主要材料に連動するため詳細は割愛)
 2.可能性のある材料系の現時点での案の提示(排他的
 - なものではない)
- 3.個別の物質・材料にフォーカスせずに、材料のポテン
 - シャルの科学的な理解を軸に分類
- 4.加速アイテムを整理

13/27

③材料候補·物性目標設定 触媒材料



前提:

- ✓ 過電圧分離から、1桁以上の活性向上が必要(>70 mV)。
- ✓ 報告例のある既存触媒ベースでは2030年目標が限界と 判断。
- ✓ 伸びしろは大きいが既存の触媒とは異なる開発が必要。

現行技術からの開発要素の新規度





③材料候補·物性目標設定 触媒材料

検討数 vs 検討範囲の技術的なロードマップが必要

- ✓ DX技術が必須(MI、計算、自動自律実験を含む)
- ✓ 計算は検討範囲を狭めるスクリーニング技術が重要
- ✓ 検討可能な数の飛躍的増加のための技術も重要

Seong-Hoon Jang et al. *Adv. Energy Mater.* 2206036 (2022).





個々の材料の研究より、3x技術が発展しきるまでは、検討数/検討範囲を向上させる戦略の先鋭化が重要か。

③材料候補·物性目標設定 電解質膜材料

15/27

電解質膜材料:伝導メカニズムの想定をクリアにした開発が必要

前提:

- ✓ 過電圧分離から、数十mV程度の伸びしろが存在。
- ✓ 膜厚1µm程度がターゲット(~40 mV向上)。機械強度が確保できる限り、 薄膜化で抵抗は低減。水管理でも有利。

✓ 既存技術ではガス遮蔽性と抵抗値が膜厚でトレードオフ。

プロトン伝導体はメカニズムの視点から2つのタイプに分類。既存の膜は Type 1であり、随伴溶媒(水)を必要とするものであり、100℃以上での利 用を目指すには、検討方向は以下の2つが主要なもの。機械的強度は共通課 題。現行技術からの開発要素の新規度

Type 1

- 溶媒の検討(高沸点、溶出無し)
- 保水性向上(120℃でも保水)
- イオンチャネルの屈曲度の低減



Nature Materials 2018, 17, 725

Type 2

- 膜化技術の検討(量子篩効果やグロッタス 機構による伝導材料の薄膜化)
- プロトン選択性がType 1より遥かに高い ため薄膜化が原理的に有利(強度は除く)。
- MEA設計や加湿システムへ大きな変化





③材料候補·物性目標設定 電解質膜材料

電解質膜(AEM):系が変わる材料アイテムの一つ

検討の位置づけ:

- ✓ 現行システム(純水素PEM)との材料の視点からの技術的比較
- ✓ セル性能の伸びしろの包括的な理解。
- ✓ 脆い材料を電解質膜として利用する革新的な技術が共通課題か。アカ デミックな興味のみを追求した研究だと加速されにくいテーマ。
- ✓ 膜単独での視点ではなく、全体を俯瞰して改善の検討も必要か。

AEMのメリット(対PEM)

- 触媒材料の高い元素自由度
- ORR触媒の高活性(世界最高活性もアルカリ性で報告)
- 耐酸性材料が不要
- 水電解の分野での利用(開発の相乗的な加速が可能)

AEMのデメリット(対PEM)

- PEMの1/2~1/3以下の低イオン伝導率(活性化エネルギーが高い)
- 第四級アンモニウムの不安定性(検討例は蓄積されてきたのでMI研究?)
- 機械的に脆い(薄膜化が難しい)
- HOR触媒の低活性
- CO2除去が必要(システム課題)
- 水管理のシステム設計から再検討が必要(システム課題)



J. Power Sources 375 (2018) 170-184

③材料候補・物性目標設定 その他

17/27

部材(触媒層、MEA、集電体、ラジカルクエンチャーなど)

これらのアイテムは触媒材料や膜材料の特徴に大きく依存するため、3x用の検討データや知見の蓄積をもとに、系が大きく変わった場合にも迅速に最適化が行える技術の醸成が優先課題と言える。

触媒層

● 触媒や担体の変更によりガス拡散性や濡れ性などが全く異なる可能性があるため最適な状態を予測するシミュレーション技術や最適化プロセスを可視化する計測技術、データの解析を迅速化するMI技術などを準備しておくことで、新材料の産業利用を迅速化する。

MEA、流路、集電体

 材料側の変化への対応と、製造プロセスの効率化や新技術の導入による最適化という2つの視点が存在するため、特に 容易な変更が難しい後者については早い時期に検討を進める必要があると考えられる。計測技術(中性子イメージング など)やシミュレーション技術は成熟しつつあり、目標を具体化しつつ、開発をより支援するための体制作りが必要であ る。

ラジカルクエンチャー、触媒コーティング剤など

 ・ 膜や触媒材料と組み合わせて用いることで、性能や耐久性を向上可能なアイテムも存在する。これらの検討は、材料その ものの特性に大きく依存するため、材料の検討が一定レベルに達してから検討を始めるものと、圧倒的な性能変化をも たらし、材料の設計すら変えられるゲームチェンジを起こせる可能性のあるものに分けて検討時期を整理すべき。

④-1 機構·現象解明/解析 解析技術概要

- ◆ 燃料電池には、様々な空間・時間分布を有する反応の階層構造が存在するため、様々な階層の機構・現象を解析する ための解析技術のプラットフォーム化が重要
- ◆ 40年シナリオで想定される材料の解析には、さらなる計測技術の高度化が必要(ハード、計測インフォマティクス)



④-2 機構·現象解明/解析 大型解析施設

- ◆ 世界最高性能を持つ大型解析施設の活用により、触媒反応のその場解析、水・プロトンのナノスケール解析、実機レベルの現象解析、プロセスの自動解析の実現が期待される。
- ◆ 高度なDX化、オペランド計測、自動自律実験等を可能にするための専用ビームライン設置が望まれる。







19/27

19

	SPring-8	NanoTerasu	J-PARC	
線源	放射光X線			
	高エネルギー領域(硬X線)	低エネルギー領域(軟X線)	中住士禄	
対象	構造 セルイメージング プロセス技術	界面構造/反応解析 化学結合 新原理材料開発	構造・分子運動(水、プロトン) 大視野イメージング 実機・ 材料・部品開発	
技術 (手法ニーズ例)	<u>高エネルギーX線回折・全散乱</u> 雰囲気制御下の触媒および触媒担体の 中長期構造	<u>軟X線XAFS</u> 燃料電池反応進行時の触媒上の酸素種の 電子構造・局所構造	<u>中性子イメージング</u> 燃料電池作動状態でのフルサイズセルの 水/氷分布状態	
	<u>X線小角散乱(SAX)</u> 雰囲気制御下の電解質のマクロスケールの 規則構造の解析	<u>高分解能軟X線RIXS</u> 雰囲気制御下の触媒および触媒担体の 酸素種の電子構造・局所構造	<u>中性子小角散乱(SANS)/反射率(NR)</u> アイオノマ/電解質膜、接合界面のナノスケー ル構造	
	<u>GI-WAXS, GI-SAXS</u> 雰囲気制御下のアイオノマーの構造、配向性	<u>高分解能軟X線タイコグラフィ―</u> 触媒層中のカーボン担体、アイオノマの三次元構 造	<u>中性子準弾性散乱(QENS)</u> 触媒層/電解質膜の水・プロトンの分子運動 (拡散・振動・回転)	

④-3 機構・現象解明/解析 DX技術との統合



⑤-1 機構·現象解明/計算科学 方針

21/27

■ 実験のみでは困難な現象・機構の相互、材料の特性や製品の性能を向上する方針を提示

- 触媒・電解質のナノスケール構造における反応機構の解明や物性予測
- 触媒層・GDL等のメゾスケールの不規則多孔体構造に起因した物質移動特性の予測
- 材料特性に基づくセル・スタック性能予測、実運転モードに対するFCシステムの予測、等
- 触媒の活性や安定性、電解質材料のイオン伝導度などを高速に予測し、これらのデータを蓄積し、 データベースから効率的かつ自動的に有望な材料を探索するハイスループットスクリーニング技術
 モデルならびに予測の妥当性を検証するための実験・解析との密接な連携が重要



⑤-2 機構・現象解明/計算科学 技術開発テーマ



⑤-3 機構・現象解明/計算科学:考え方



⑤-4 機構・現象解明/計算科学:アプローチ



⑤-5 機構・現象解明/計算科学 部材・製品・システムレベル 25/27

- 触媒層やGDL・MPLおよびセパレータを含むガス拡散抵抗低減は限界に近い設計が必須
 40年に向けた新たな材料に対する触媒層の在り方(担体・アイオノマ構造、表面濡れ性等)も変わる
 可能性→上記部材の構造・機械特性を含めてセル・スタック性能への影響の予測、MBDによるFCシステム性能・劣化予測の加速
- 通常走行時・氷点下起動の液水挙動(部材間スケールギャップ)とガス拡散性、劣化との相関、液水 も考慮した性能向上のための部材構造および組み合わせの設計・最適化



求められる人材

・現状技術の究極や原理原則の追求によりイノベーションを実現する人材
 ・個別要素技術を融合し、セル・スタックの機能設計ができる人材

研究人材の確保

- ・研究人材・若手研究者への長期的視点での投資
 - ・若手(高校/学士/修士)から、水素・燃料電池に触れる機会の創出
 - ・博士課程・取得後の異分野経験などを含めたキャリアパスの整備
- ・博士取得後の雇用機会の確保
- ・海外研究機関との連携・人材の流動

異分野融合のチーム型研究

- ・複数の<mark>専門分野融合</mark>で構成されたチーム構成 材料/電気化学/分析解析/計算機科学/化学工学/ プロセス/流体/伝熱/機械工学・・・
- ・俯瞰的・統合的なマネジメントができる
 プログラムダイレクタの育成

産官学連携・人材流動による研究者育成

- ・学から産(サバティカル)
- ・産から学(社会人博士)
- ・産学クロスアポイントメント
- の人材流動を通じた研究者育成

⑥人材育成





科学技術·学術政策研究所(文部科学省) https://www.nistep.go.jp/sti_indicator/2019/RM283_35.html



ご清聴をありがとうございました