

発表No.A1-12

**燃料電池等利用の飛躍的拡大に向けた共通課題解決型産学官連携研究開発事業
／ 水素利用等高度化先端技術開発
／ マテリアルズインフォマティクスによるPEM型水電解装置の非貴金属化の研究開発)**

発表者名 高橋啓介

団体名 北海道大学、北陸先端科学技術大学院大学、
熊本大学、国立研究開発法人物質・材料研究機構

発表日

2025年7月15日

連絡先：高橋啓介
北海道大学
keisuke.Takahashi@sci.hokudai.ac.jp

事業概要

1. 期間

開始 : (西暦) 2023年6月

終了 (予定) : (西暦) 2025年3月

2. 最終目標

固体高分子(PEM)型水電解のアノードのイリジウムフリー触媒の開発
2.0 A/cm²で1.82 V以下で動作し、2.0 A/cm²・1000時間で1.88 V未満

3. 成果・進捗概要

本研究開発では、ハイスループット実験とマテリアルズインフォマティクスを組み合わせ、固体高分子（PEM）型水電解におけるアノード材料の非貴金属化を実施した。本研究の目的は、従来の酸化イリジウム（IrO₂）に依存しない、高活性かつ高耐久性を有する新規アノード触媒の探索である。本研究では、ハイスループットPEM型水電解装置を独自開発し、迅速かつ効率的な評価を可能にした。特に、電解質膜とアノード・カソード電極材料が一体化した膜電極接合体（MEA）を短時間で作製する簡易プロセスを開発し、触媒合成から評価までの時間を大幅に短縮した。触媒の開発においては、含浸法や共沈法を駆使し、酸化物、硫化物、炭化物、リン化物など多様な化合物を対象に2元素および3元素からなる200種類以上の材料を合成した。これらの触媒を用いてハイスループット実験を実施し、電流0.1Aから3.0Aの範囲で電極電位を測定することにより、大規模なPEM型水電解のビッグデータを構築した。このデータは、機械学習およびデータマイニング技術を活用することで解析を行い、触媒の活性や耐久性の相関を明らかにした。データ解析の結果、酸化イリジウムに匹敵する触媒活性を示す複数の材料を発見し、さらに酸化イリジウムを超える耐久性を持つ材料も特定した。しかし、それぞれの材料において、耐久性の高いものは活性が低く、活性の高いものは耐久性が劣るというトレードオフが確認された。これにより、さらなる最適化が必要であることが明確になり、今後の研究課題として機械学習による活性と耐久性の両立を図る合成戦略の構築が求められる。本研究の成果は、PEM型水電解のコスト削減と持続可能な水素製造の実現に大きく貢献するものであり、非貴金属系触媒の実用化に向けた重要な知見を提供するものである。

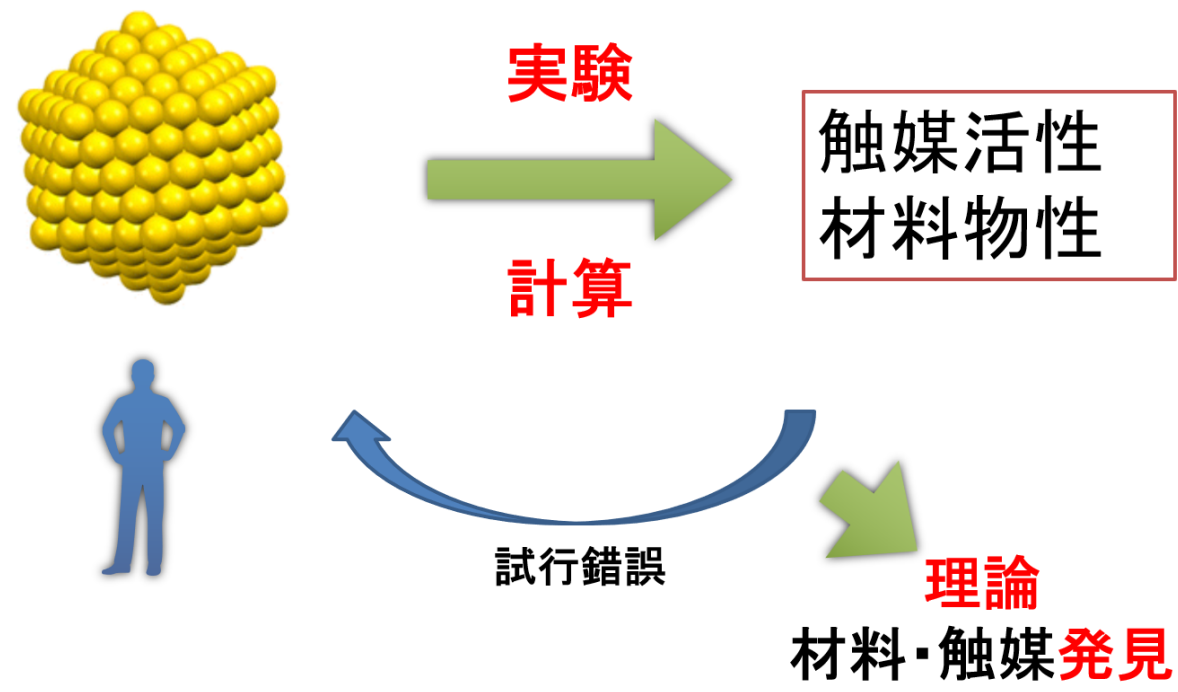
インフォマティクス

“統計学、データ解析、可視化、機械学習を
統合し総合的にアプローチする学問”

“データ科学を用いてデータから
問題を解決すること”

マテリアルズインフォマティクスとは？

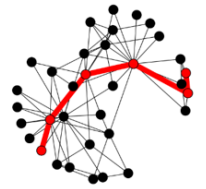
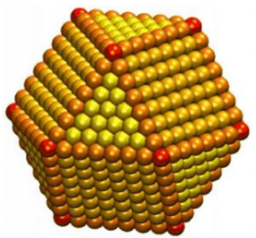
実験・計算・理論



インフォマティクス

多次元空間で化学の法則を発見

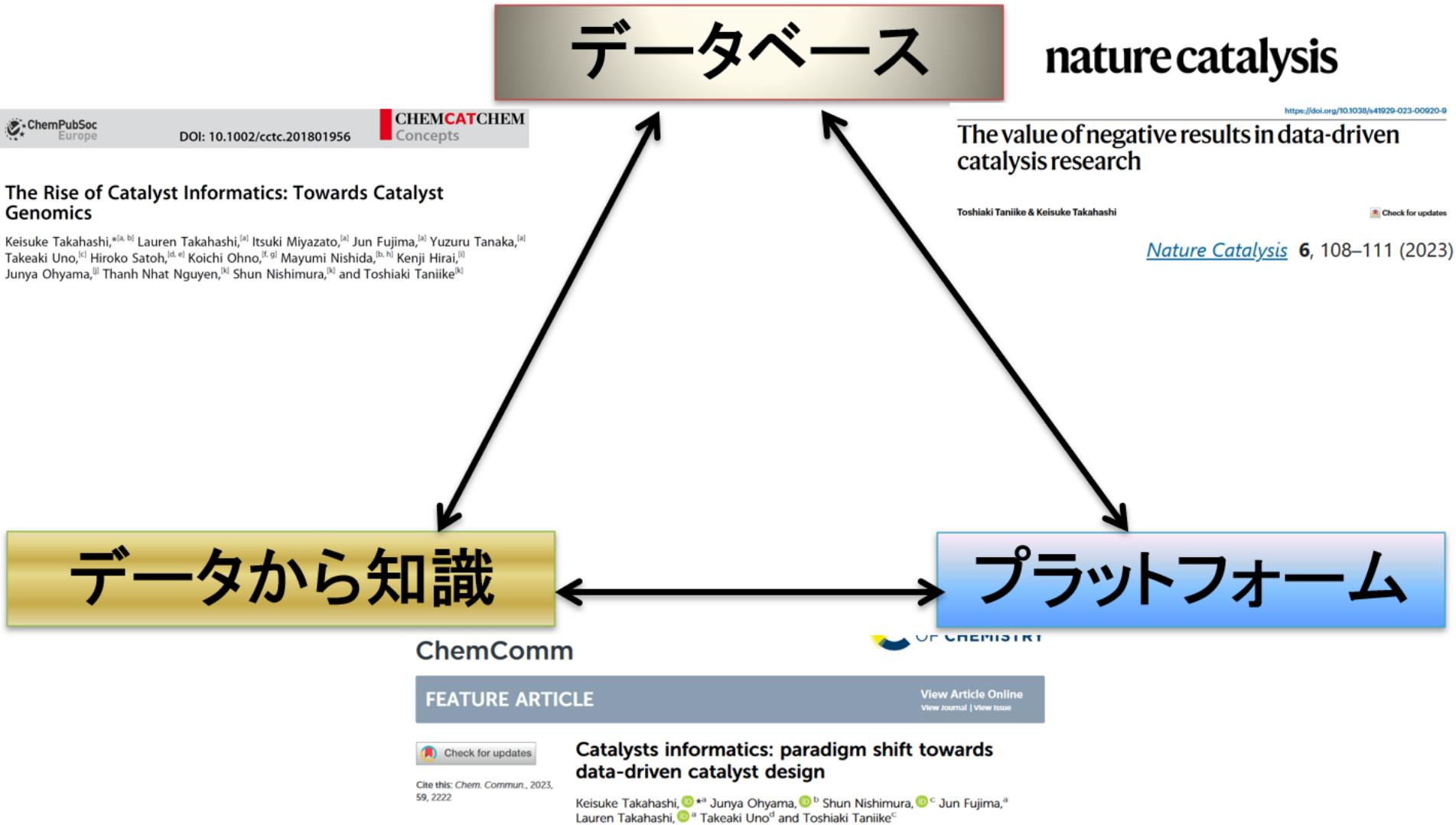
触媒活性
材料物性



機械学習・データ科学
人工知能

従来とは逆の問題

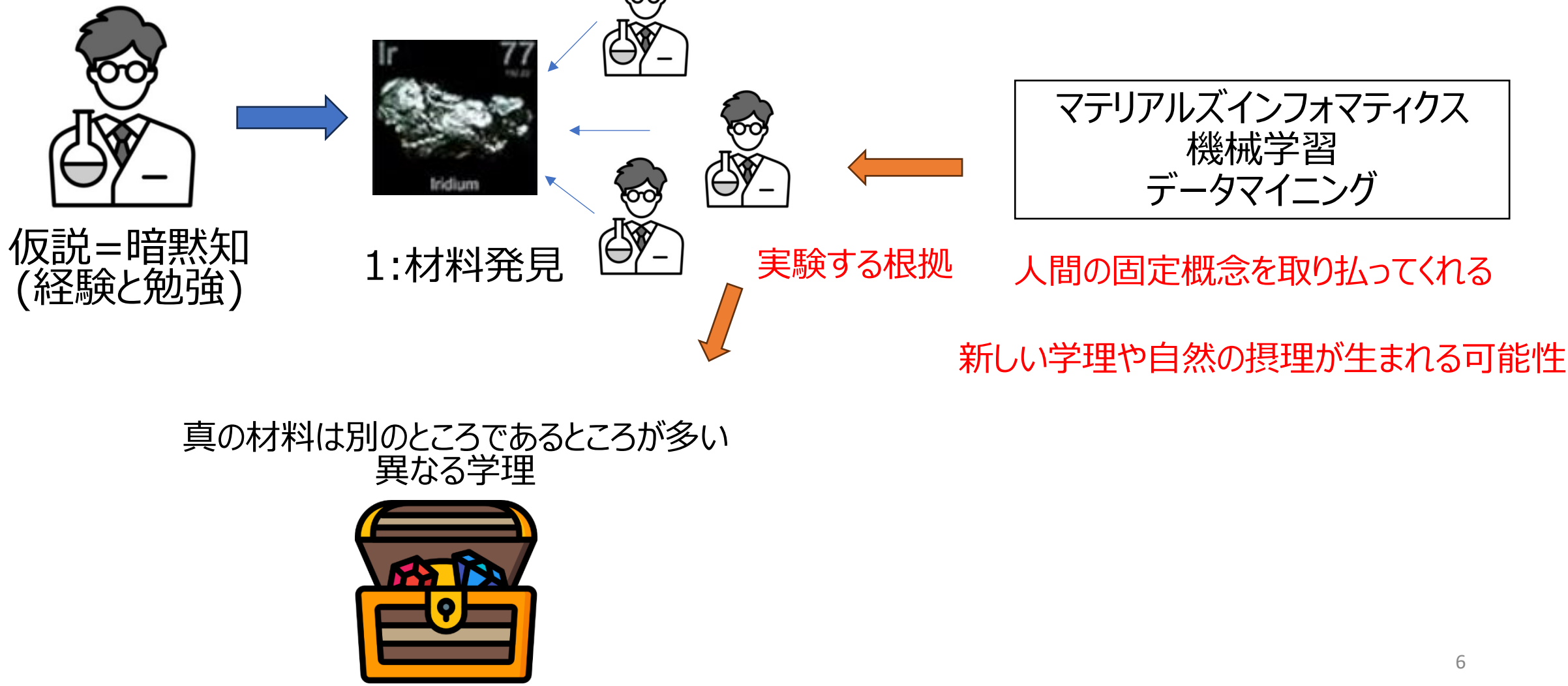
マテリアルズインフォマティクス(MI)の3つの重要要素



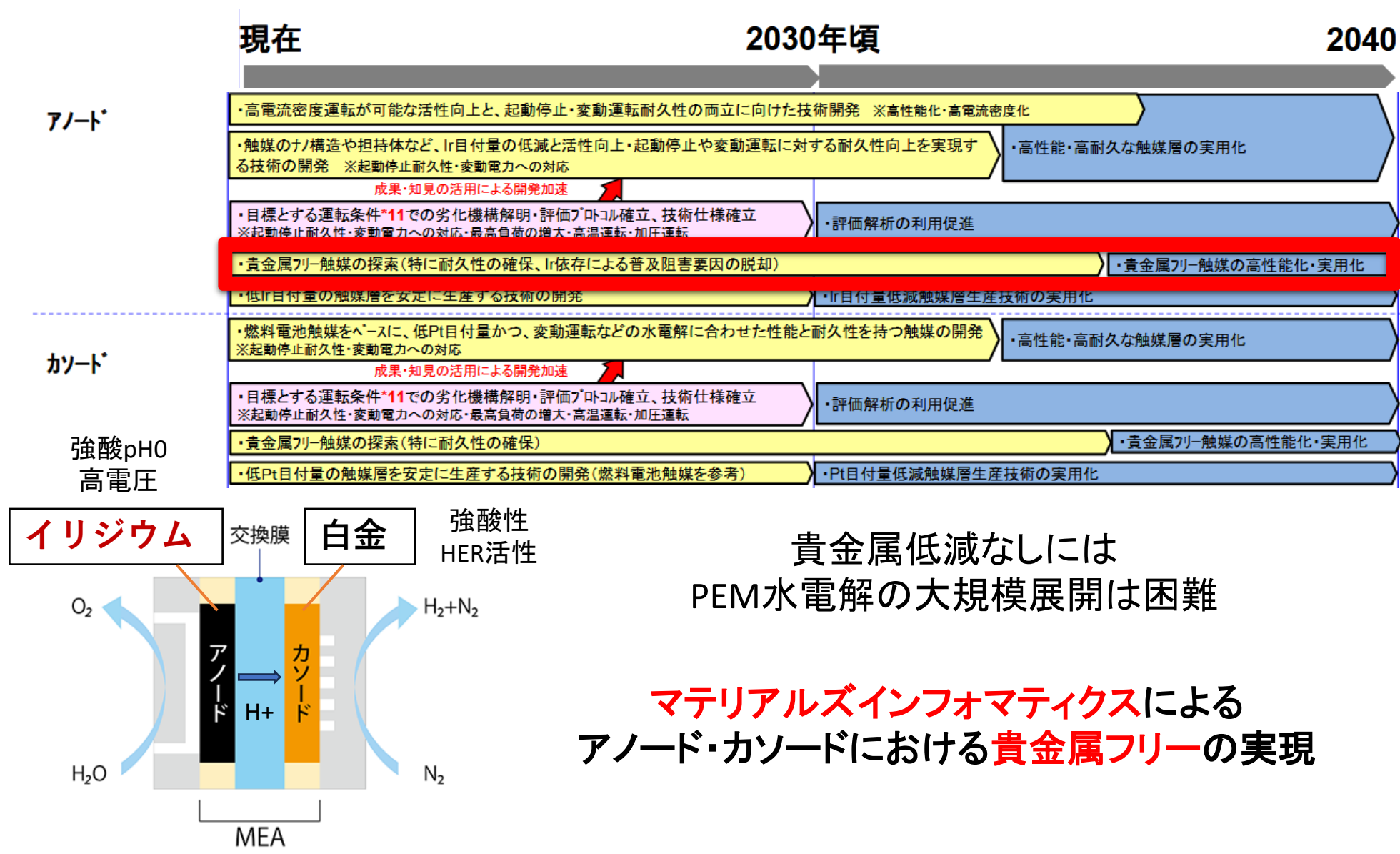
仮説からの脱却を手伝ってくれる

学理が正しいのであれば新規材料がもっと容易に見つかるはず

2: 見つかった材料に対する学理の確立
研究者はその学理、材料の周辺を探索



事業の位置付け・必要性



2030年の予測と資源問題

2025年1月



イリジウム(アノード)

- 国際エネルギー機関（IEA）:PEM水電解装置の累積容量は80GW
- 現在の技術水準（Ir使用量400g/MW）では、**約32トンのIr**が必要
- **年間Ir生産量（7～8トン）の約4～5倍**に相当-物理的に不足
- **約90%が南アフリカ・ジンバブエ**に依存

白金(カソード)

- 現在の技術水準（Pt使用量200g/MW）では、**約16トンのPt**が必要
- **年間Pt生産量（180トン）**の9%相当
- **南アフリカ**（66%）、**ロシア**（21%）、**ジンバブエ**（10%）、**カナダ**(8%)、**米国**(5%)

*欧州ではIr, Pt不足が深刻化しており“非貴金属PEM”の研究開発が加速中

**非貴金属化を進めないと、資源制約のためPEM型の大規模普及は困難
日本の水電解の国際競争力の危機**

データベース



ハイスループット実験
文献

インフォマティクス

nature catalysis
The value of negative results in data-driven catalysis research
Toshiaki Taniike & Keisuke Takahashi
Nature Catalysis 6, 108–111 (2023) | Cite this article

潜在的な関係性・パターンを抽出

3つの異なる独自のMI手法

MonteCat法

ネットワーク法

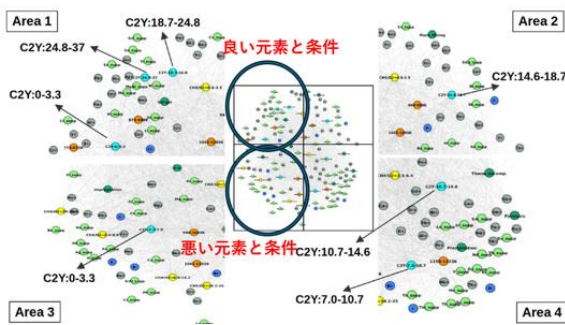
データマイニング

機械学習

$$Y=f(x)$$

Y:物性

X:材料組成



予測

材料組成
合成方法
プロセス最適化
寿命

相性診断

MonteCat: A Basin-Hopping-Inspired Catalyst Descriptor Search
Algorithm for Regression Models

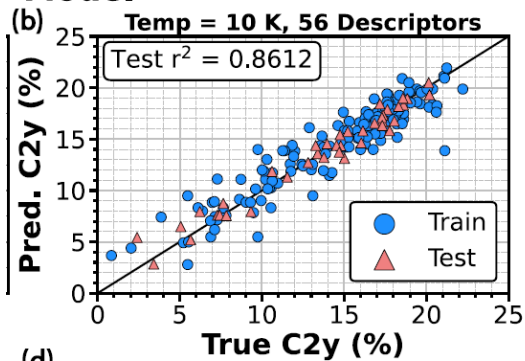
Fernando Garcia-Escobar, Toshiaki Taniike, and Keisuke Takahashi*

Cite This: <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.3c01052>

Read Online

MonteCat-機械学習

非線形を線形化-外挿予測
機械学習の課題を克服



メタン酸化カップリング反応データ-1000件
材料組成-高次元物理量-特長量生成(50万)
5時間で56個の物性決定する記述子決定

他のMI研究者は非線形データを
線形化で回帰させる技術は持っていない

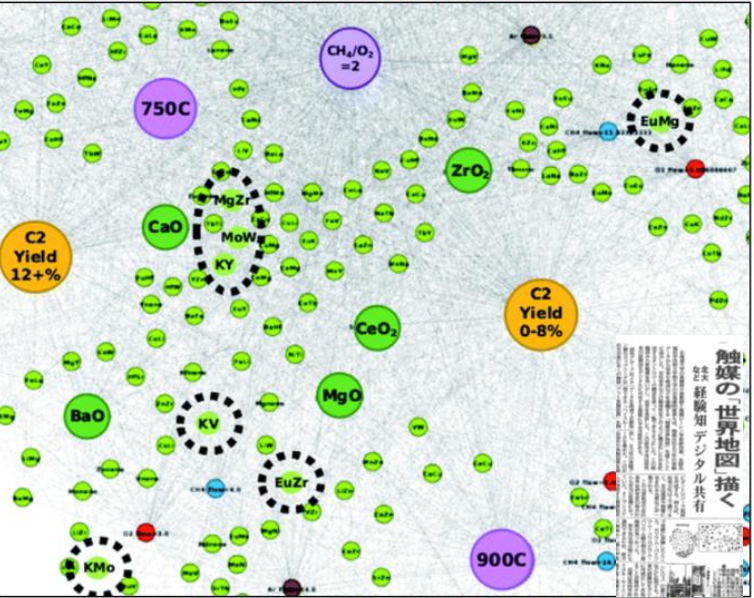
MonteCat法により3つの材料特許を出願
特開2024-112157
特開2023-079580
特開2023-039118

Constructing Catalyst Knowledge Networks from Catalysts Big Data in Oxidative Coupling for Methane for Designing Catalysts

Lauren Takahashi^{1,2}, Thanh Nhat Nguyen³, Sunao Nakanowatari³, Aya Fujiwara³, Toshiaki Taniike^{1,2}, Keisuke Takahashi^{1,2*}

ネットワーク法

組成・実験条件の関係性をネットワーク化



触媒検索エンジン

機械学習を用いないホワイトボックス法

工業触媒の選択率をX%向上した実績

事業の位置付け・必要性

1:文献データ収集

1:ハイスループット実験
データ収集

語彙・語句・取得するデータの決定
(研究者によって表現方法、項目、質がことなるため)



2:データ前処理

データを全て目で確認
異常点除去
機械学習適用できるようにデータ成形
空間の制御



3:データ可視化

傾向・相関の抽出
データとり直しの有無決定

機械学習手法の検討
(40種類から2つ選定)

予測する変数の選定
(回帰か分類機?)
(線形か非線形?)
(内挿か外挿?)
(確率を用いるか?)

4:機械学習

機械学習手法の決定

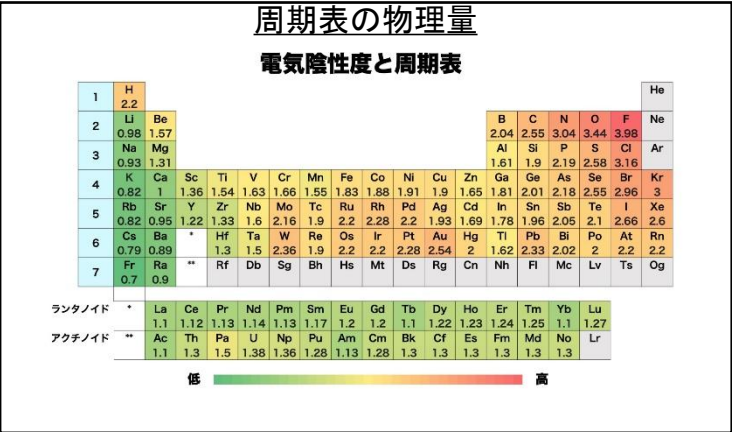


5:触媒記述子の合成

一般的な方法

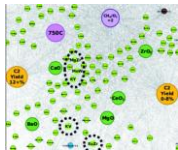
ワンホットエンコーディング

向き	東	西	南	北
東	1	0	0	0
西	0	1	0	0
南	0	0	1	0
北	0	0	0	0



MonteCat法
独自開発

今回の方法



今回の方法
ネットワーク法
独自開発

アプローチ

- 周期表における周期
- 原子番号（原子核内の陽子数）
- メンデレーエフの周期表における原子番号
- 原子半径
- Rahmらによる原子半径
- 原子体積
- 原子量（原子の質量）
- ICSDデータベースにおける原子体積
- 結晶格子の単位胞の物理的寸法
- ファンデルワールス半径
- Alvarezによるファンデルワールス半径
- Batsanovによるファンデルワールス半径
- Bondiによるファンデルワールス半径
- DREIDINGによるファンデルワールス半径
- MM3によるファンデルワールス半径

- 基底状態におけるエネルギー
- 体心立方格子の推定格子定数
- 面心立方格子の推定格子定数
- 基底状態における磁気モーメント
- 基底状態における原子体積
- Herfindahl-Hirschman Indexの生産値
- Herfindahl-Hirschman Indexの埋蔵量値
- 20°Cでの比熱
- ガス塩基性
- 第一イオン化エネルギー
- 融解熱
- 生成熱
- 質量比熱容量
- モル比熱容量
- 蒸発熱
- 線膨張係数
- 沸点

- RowlandとTaylorによるファンデルワールス半径
- Truhlarによるファンデルワールス半径
- UFFによるファンデルワールス半径
- Braggによる共有結合半径
- Corderoらによる共有結合半径
- Pyykkoらによる単結合の共有結合半径
- Pyykkoらによる二重結合の共有結合半径
- Pyykkoらによる三重結合の共有結合半径
- Slaterによる共有結合半径
- C6分散係数（原子単位）
- C6分散係数（原子単位）
- 295Kにおける密度
- プロトン親和性
- 双極子分極率
- 電子親和力
- 共有電子対を引き寄せる傾向
- Allenの電気陰性度尺度
- Ghoshの電気陰性度尺度
- Paulingの電気陰性度尺度
- 基底状態におけるバンドギャップエネルギー

- ブリネル硬さ
- 体積弾性率
- 融点
- 単結合の金属半径
- 12最近接原子を持つ金属半径
- 25°Cでの熱伝導率
- 音速
- ビッカース硬さ
- 瞬間双極子を形成する能力
- ヤング率
- ポアソン比
- モル体積
- 全未充填電子数
- 全価電子数
- d軌道の未充填電子数
- d軌道の価電子数
- f軌道の未充填電子数
- f軌道の価電子数
- p軌道の未充填電子数
- p軌道の価電子数
- s軌道の未充填電子数
- s軌道の価電子数

- 加重平均
- 加重分散
- 幾何平均
- 調和平均
- 最大プーリング
- 最小プーリング
- 加重和

化合物は7個の異なる平均で定義
1化合物に対して $58 \times 7 = 406$ の記述

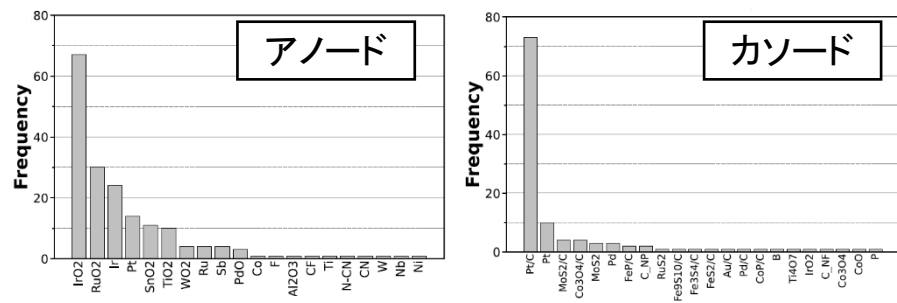
例: Fe_3O_4
 $(27 \times 3 + 8 \times 4) \div 7 = 16.14$

NEDO前事業-PEM文献データとMI

論文投稿中
北海道大学

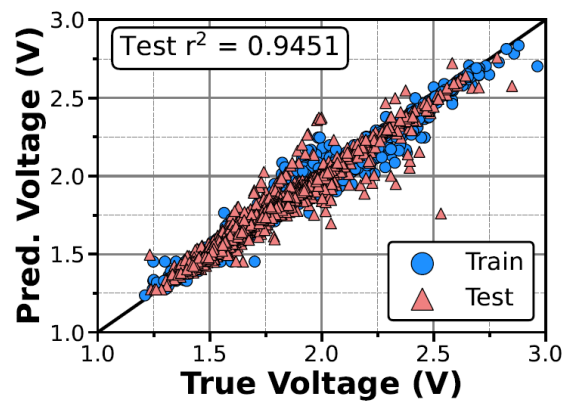
過去30年間のPEM文献データ
1万件収集

元素の頻度解析

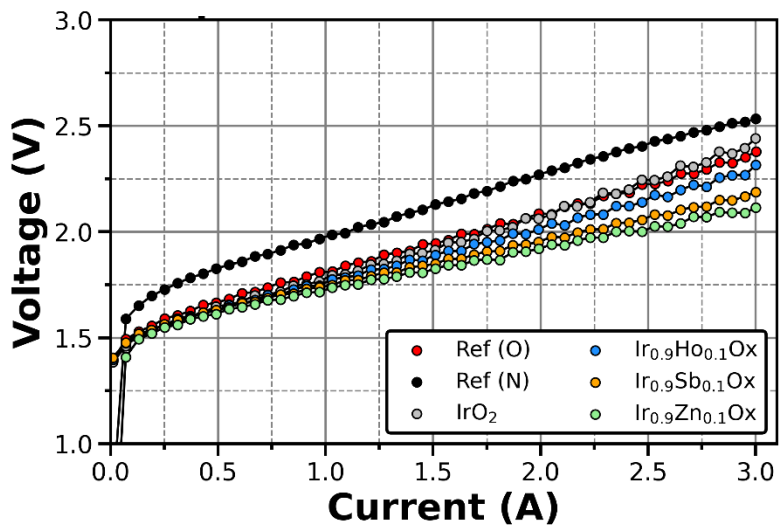


データの88%がイリジウム・白金

MonteCat-機械学習



IrO+Xの予測
機械学習がPEM型に
適応できること確認

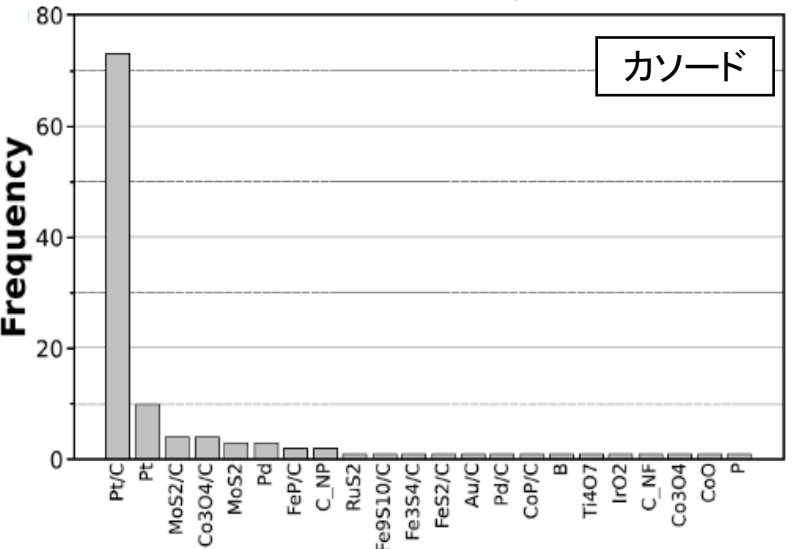
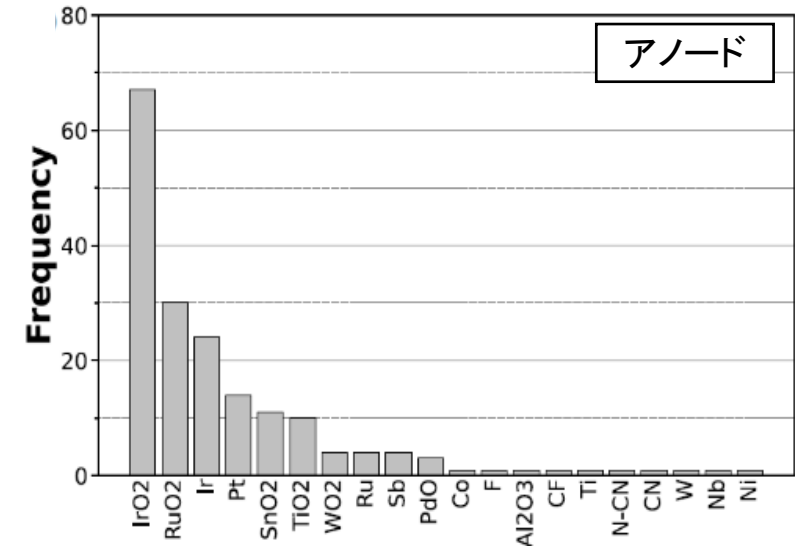


MIによって予測されたHo, Sb, Znは
Ir量低減+活性化させることを実験で実証

非貴金属予測はデータの
偏りのため不可能であったがMIによる
PEM型材料開発が迅速にできることを証明

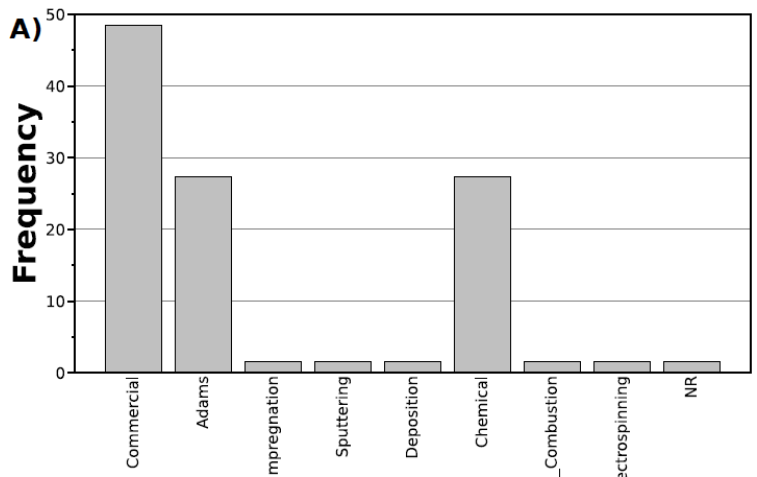
NEDO前事業-PEM文献データとMI

元素の頻度解析



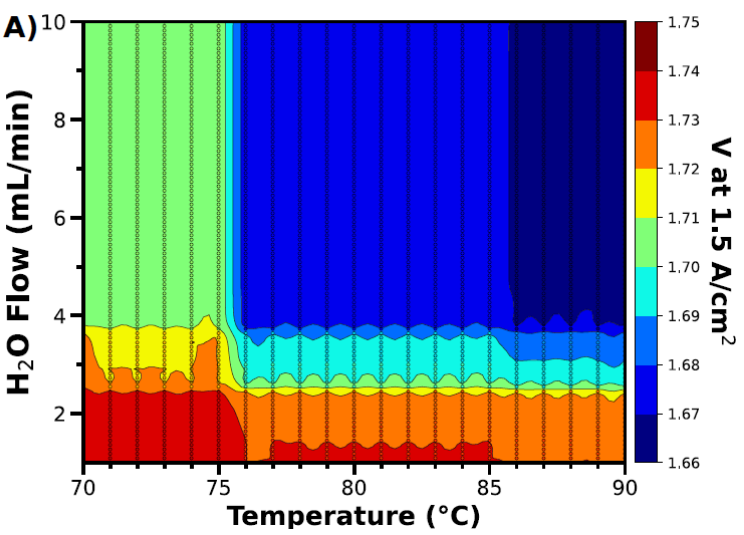
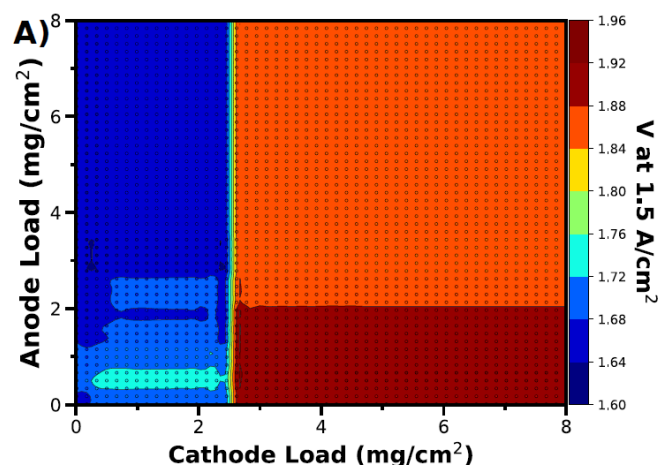
データの88%がイリジウム・白金

過去30年間のPEM文献データ 1万件収集

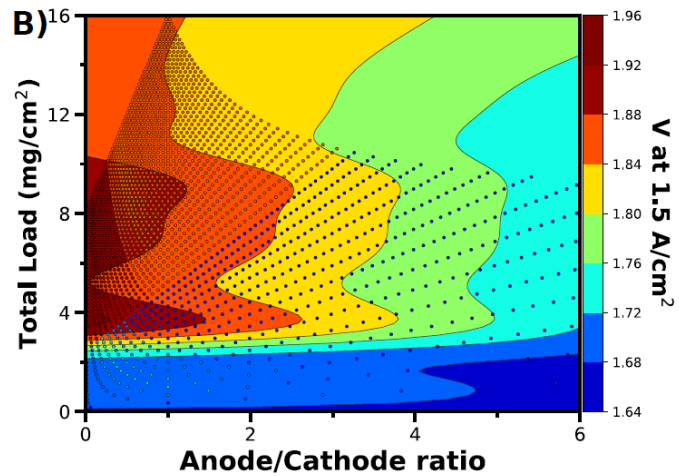


合成:市販試薬とAdams法

論文投稿中 北海道大学

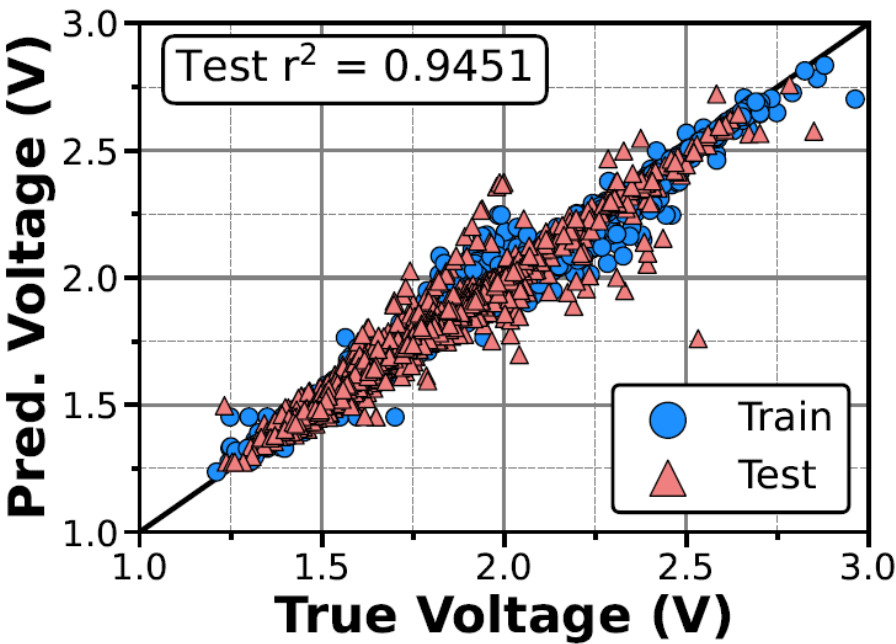


水フローレートと温度



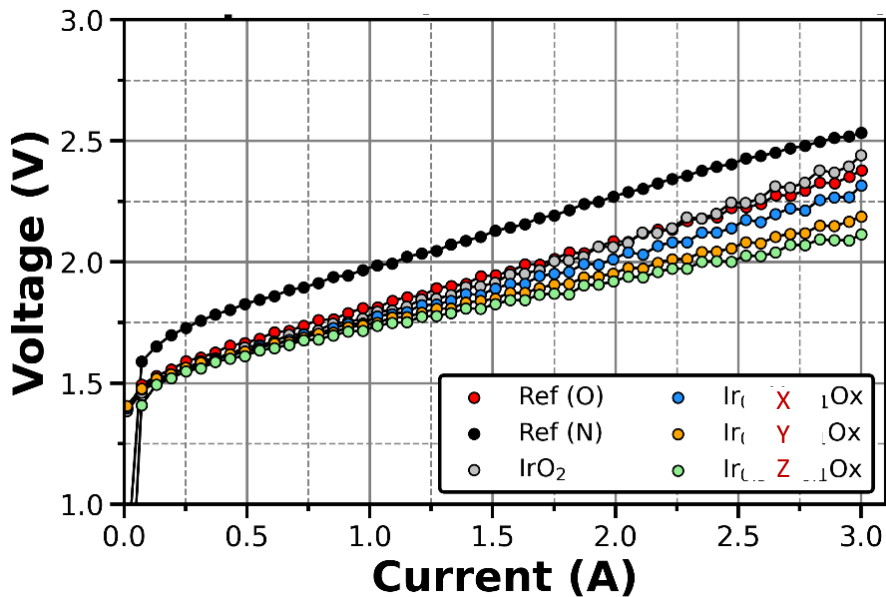
アノード・カソード比:最適値

MonteCat-機械学習



IrO+Xの予測
機械学習がPEM型に
適応できること確認

MonteCat-機械学習



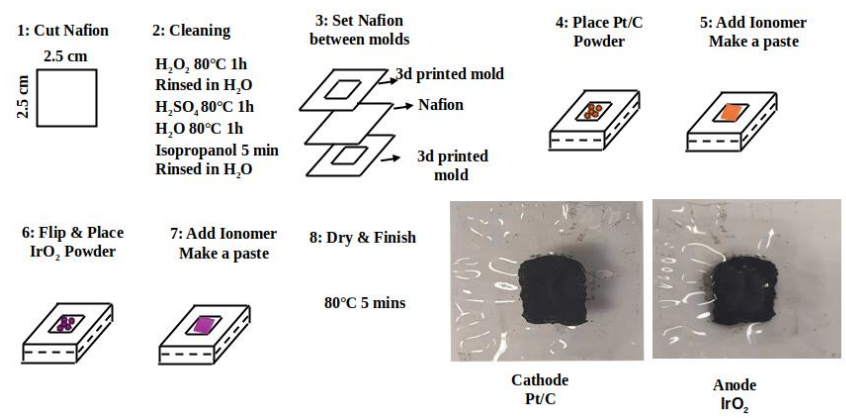
MIによって予測されたX, Y, Zは
Ir量低減+活性化させることを実験で実証

非貴金属予測はデータの
偏りのため不可能であったがMIによる
PEM型材料開発が迅速にできることを証明

独自開発ハイスループットPEMセル 10連



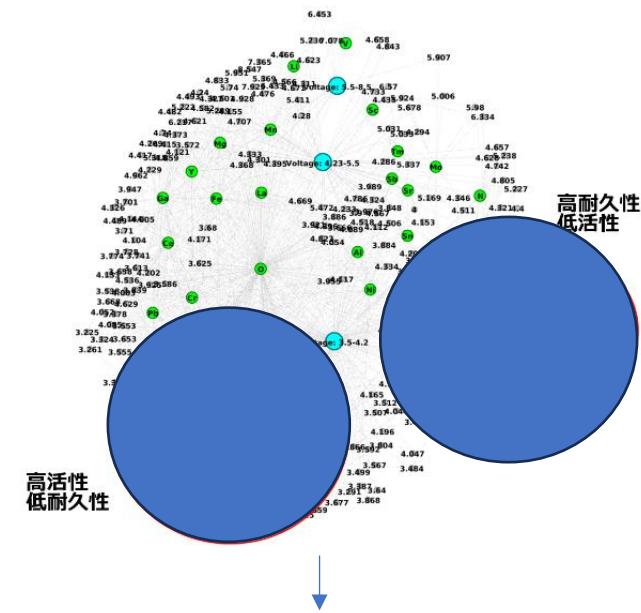
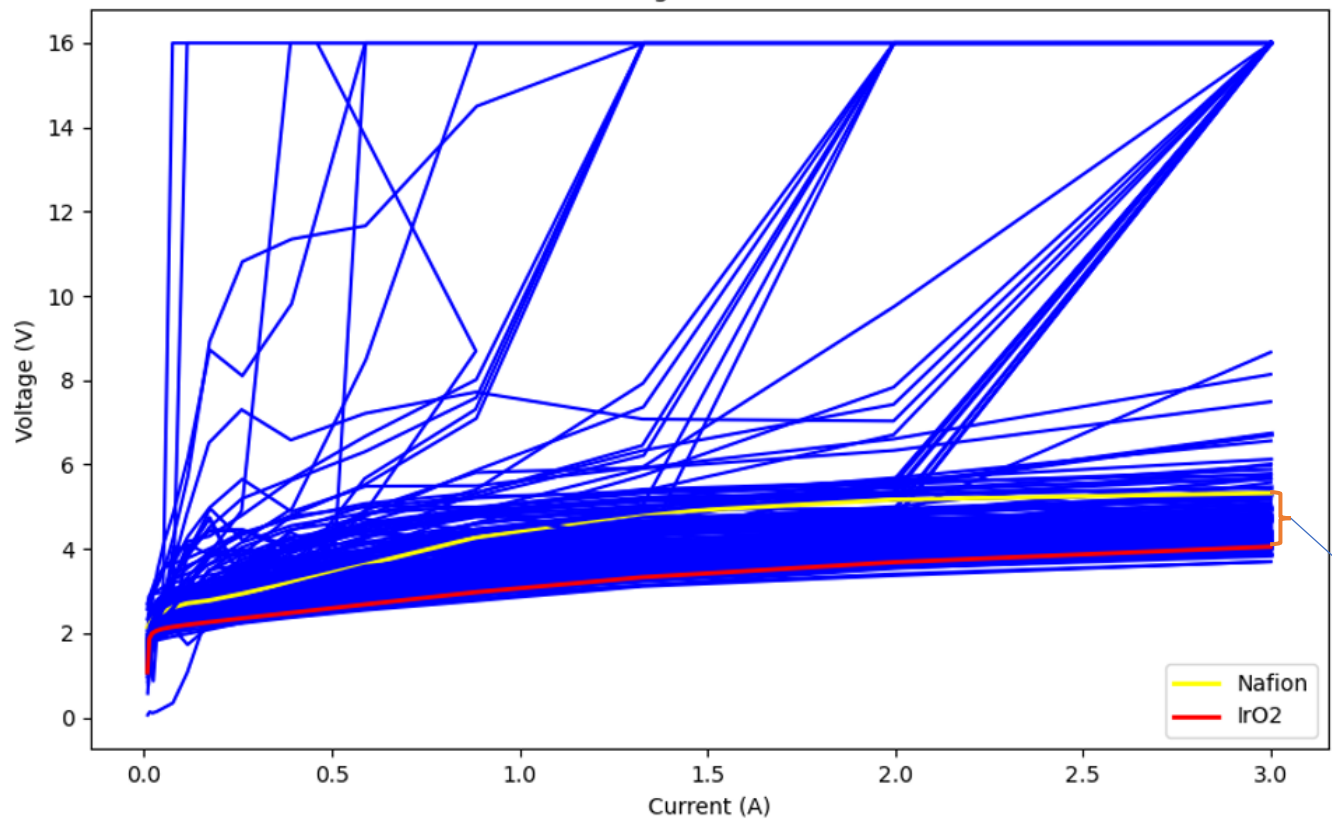
MEAの迅速作成方法の開発



ホットプレス100°C、10MPaで10分

共沈法・含浸法・Adams Method-
300アノード材料をハイスループット実験装置で評価

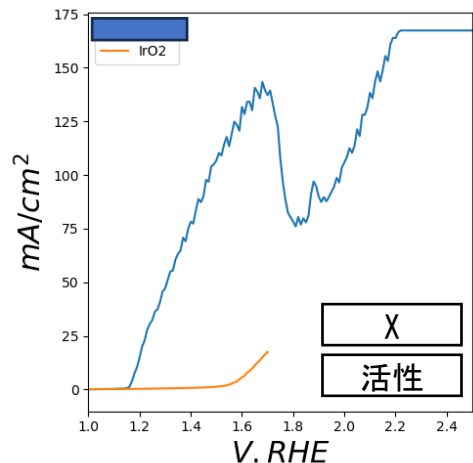
共沈法・含浸法・その他合成法-300アノード材料をハイスループット実験装置により評価しMI実施
独自ネットワーク法



IrO₂より電位の低いアノード材料Xを発見
高い耐久性を持つYを発見

PEM型水電解においてハイスループット実験とMIの実施と材料発見が可能なこと実証

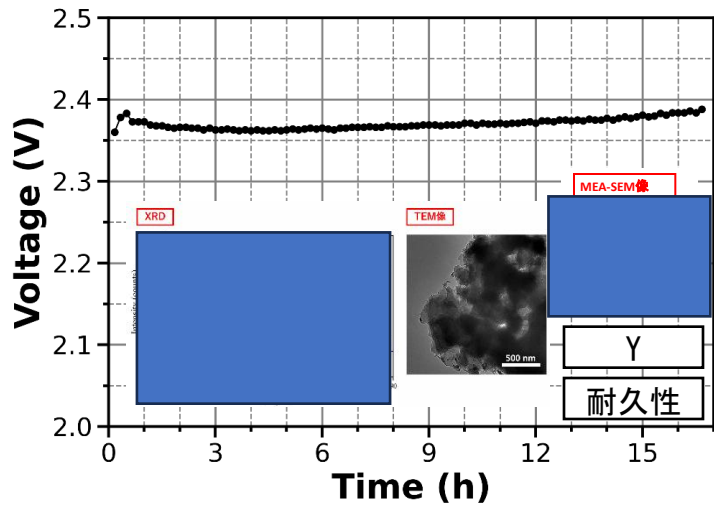
発見した活性触媒:X
回転電極でもIrOより活性があることを確認
しかし耐久性がなく、長時間運転で溶ける



北海道大学



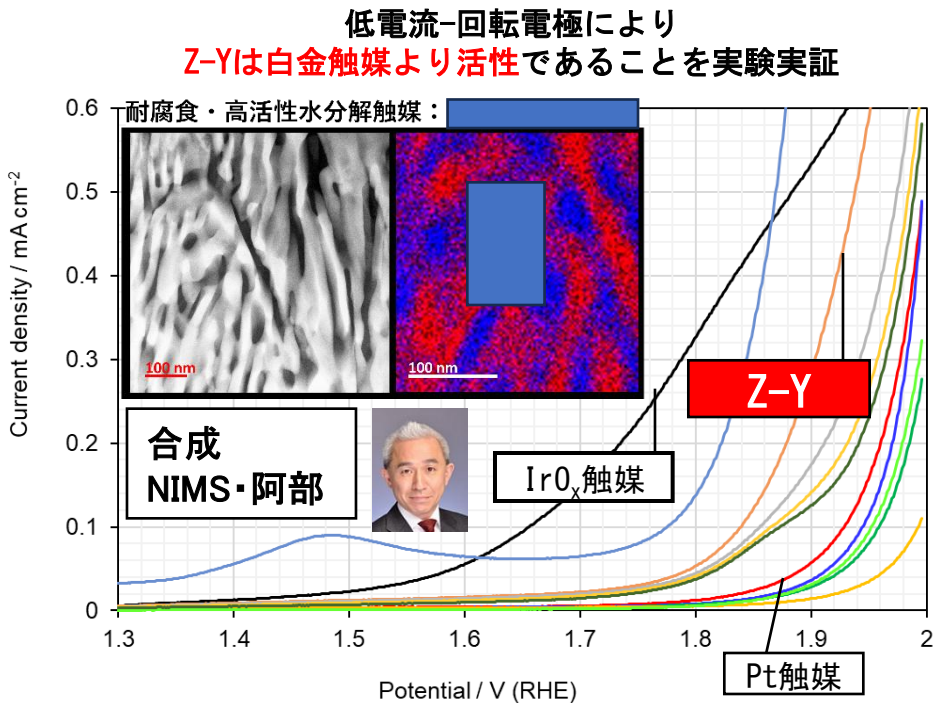
発見した耐久性触媒:Y
IrOに匹敵する耐久性、しかし活性がない



北陸先端



MI予測により高活性Zと高耐久性Yと組合わせ
× 合成技術によりナノ組織最適化＝非貴金属触媒Z-Y創製



発明名称:水電解陽極触媒、その水電解陽極触媒を含む複合部材、
およびその複合部材を含む水電解装置
出願番号:2024-122452, 出願人:高橋啓介、阿部英樹

- ・ MIにより活性・耐久性のそれぞれの材料を発見
- ・ Z-Yは白金触媒を上回る活性

- マテリアルズインフォマティクス(MI)によるPEM型水電解装置のアノード材料開発を実施
- PEM型の文献データ収集-これまでの研究から多くの知見
- 文献データと機械学習からIr使用量提言する元素が見つかった
- PEM型のハイスループット実験を開発
- ハイスループット実験とMIにより高い耐久性と高い活性の材料をそれぞれ発見
- 耐久性材料と元素Yの組み合わせにより白金より活性な非貴金属触媒を創成