

NEDOエネルギー・地球環境分野成果報告会2026

プログラムNo. 603-2-03

水素利用拡大に向けた共通基盤強化のための研究開発事業/ 燃料電池・水電解の共通基盤技術開発/ 燃料電池および水電解の材料解析共通基盤プラットフォームの構築と高度化

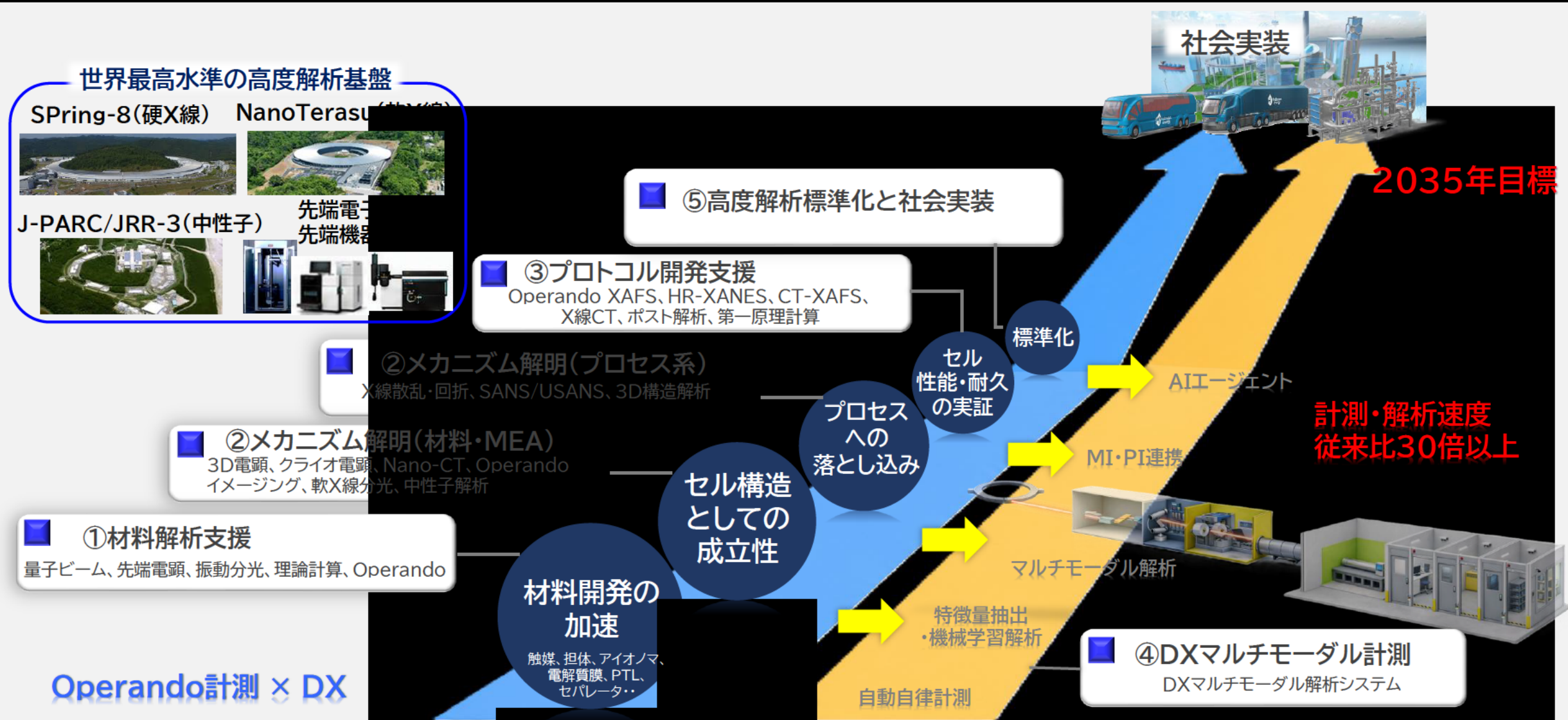
発表：2026年7月22日

国立研究開発法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構

発表者名 今井 英人

団体名 (一社) FC-Cubic*、(国) 京都大学、(国) 東京大学、(公財) 高輝度光科学研究センター、(株) 豊田中央研究所、
(国研) 量子科学技術研究開発機構、(国研) 高エネルギー加速器研究機構、(学) 立命館、(国) 島根大学、(国) 奈良女子大、(国) 東北大学
(国研) 日本原子力研究開発機構、(一財) 総合科学研究機構
(問い合わせ先) 一般社団法人FC-Cubic <https://www.fc-cubic.or.jp/>

- 燃料電池および水電解技術の2035年開発目標の実現に向けて、燃料電池や水電解における複雑な現象の理解を深化させ、材料およびシステムの飛躍的性能向上に係る研究開発に貢献する。



水素利用拡大に向けた共通基盤強化のための研究開発事業

燃料電池・水電解評価解析プラットフォーム

PEFC評価解析プラットフォーム

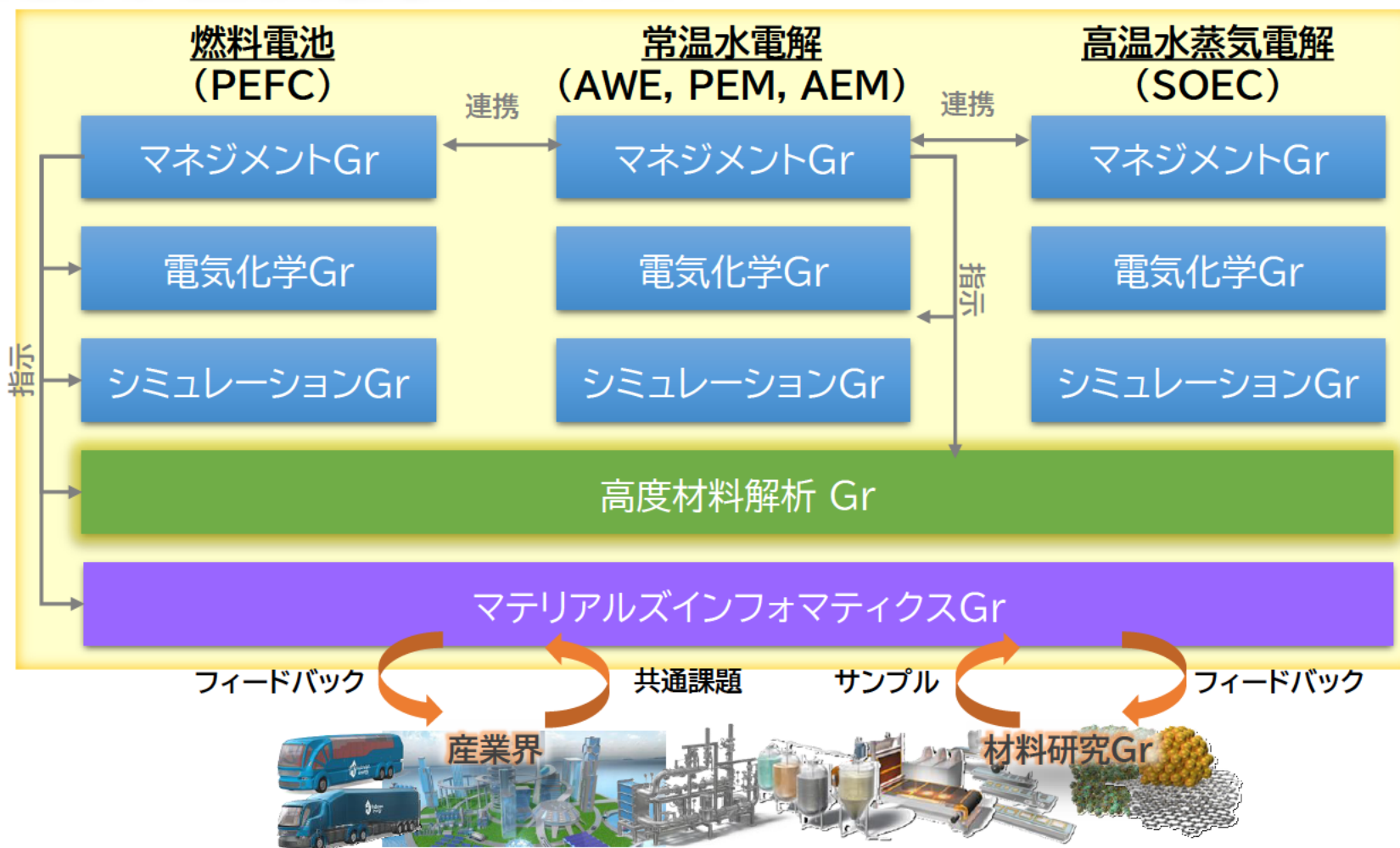
- 技術研究組合FC-Cubic
- みずほリサーチ&テクノロジーズ株式会社
- 他7機関

常温水電解評価解析プラットフォーム

- 国立研究開発法人産業技術総合研究所
- 国立大学法人横浜国立大学
- 技術研究組合FC-Cubic
- みずほリサーチ&テクノロジーズ株式会社
- 他7機関

高温水蒸気電解評価解析プラットフォーム

- 国立研究開発法人産業技術総合研究所
- 一般財団法人電力中央研究所
- 国立大学法人東北大学
- 他3機関



第17回FC-Cubic オープンシンポジウム NEDO後藤様資料をもとにFC-Cubicで作成

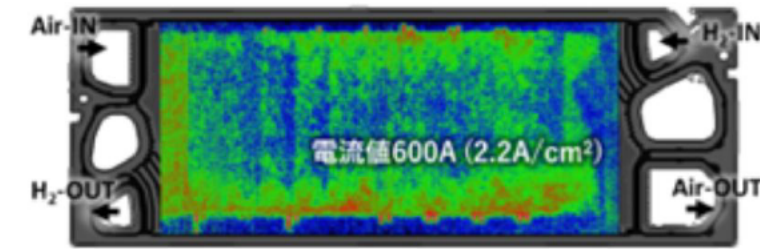
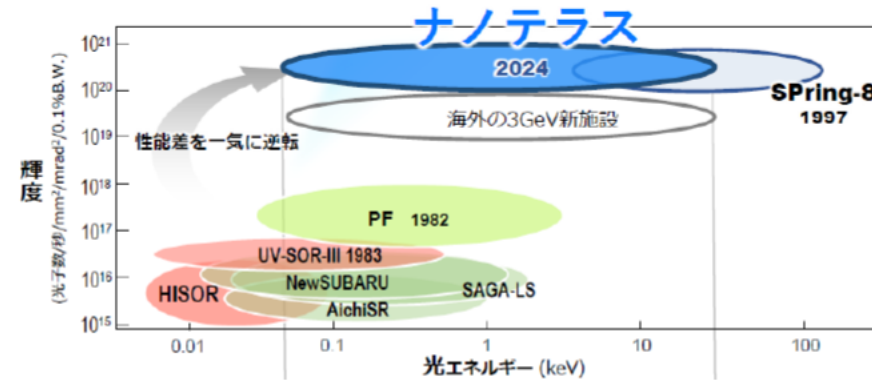
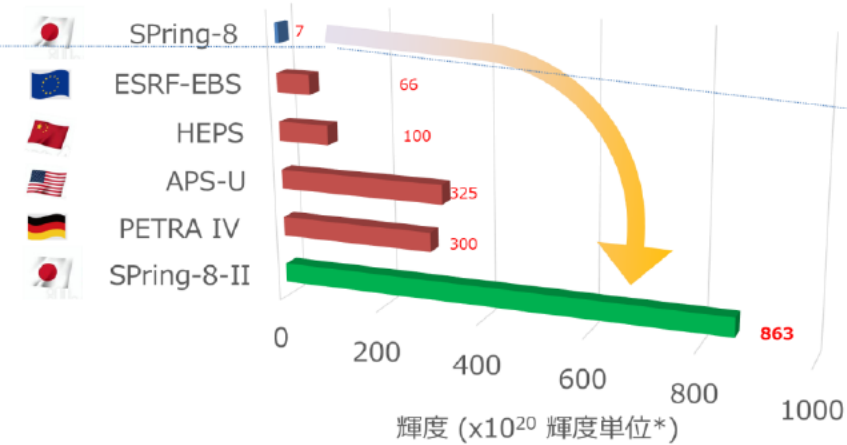
➤ 高度な評価解析技術の構築、性能発現・劣化メカニズム解明、評価プロトコル・加速劣化試験法の策定等を推進

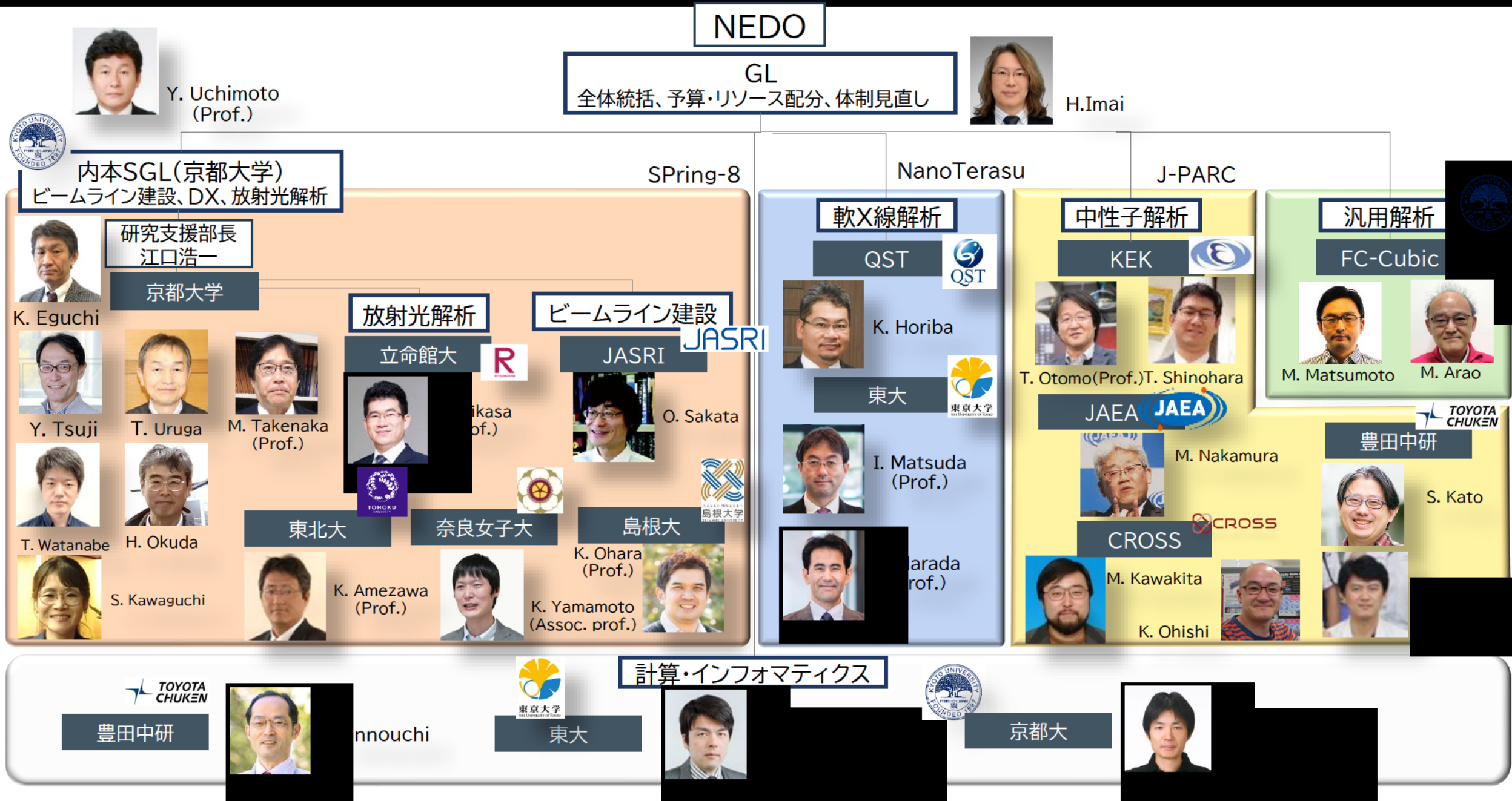
第17回FC-Cubic オープンシンポジウム NEDO後藤様資料をもとにFC-Cubicで作成

- ◆ 新素材の開発において世界最先端の量子ビーム施設を活用しつつ、「測定・解析」、「材料設計」、「合成・製造」の各工程において、AIやロボット自動制御といったDX技術を導入することで、研究開発の高速化を目指す。
- ◆ さらに、合成・製造プロセスの成果等を活用し、新たな生産技術の開発にもつなげる。



- ◆ 3つの量子ビーム施設は、今後5年でアップグレード計画が進行中。中国勢の追い上げをかわし、欧米を追い越し、トップの性能へ。
- ◆ 量子ビームのポテンシャルを最大限活用する計測・解析手法の開発と、35年/40年課題を見据えた課題解決型の解析を行える環境を施設の協力を得て進め、仕組みとして運用することで日本の競争力を強化





①材料解析支援

◆ コンシェルジュ機能の強化

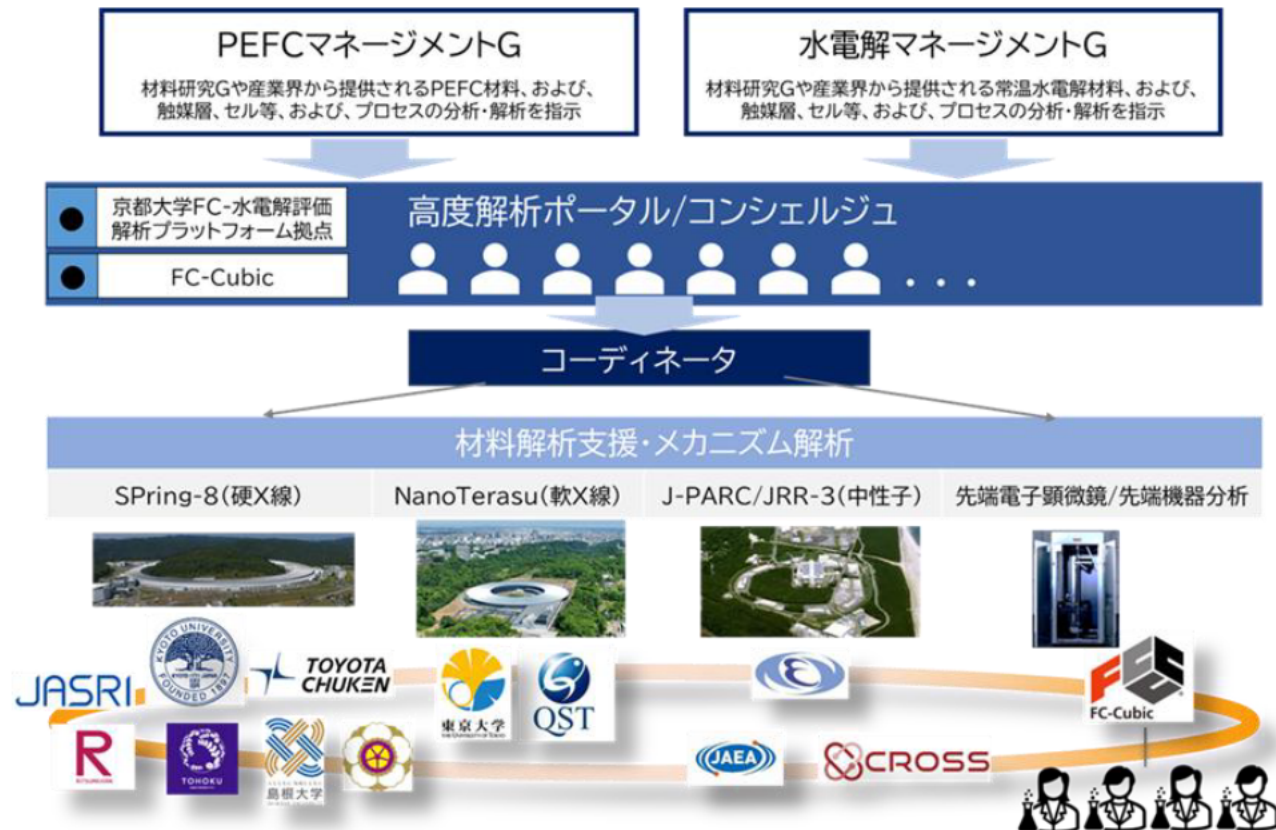
材料開発者の課題に近く深く寄り添い、ともに目標達成を目指す伴走型の材料解析支援体制



前事業で蓄積した
ノウハウ

×

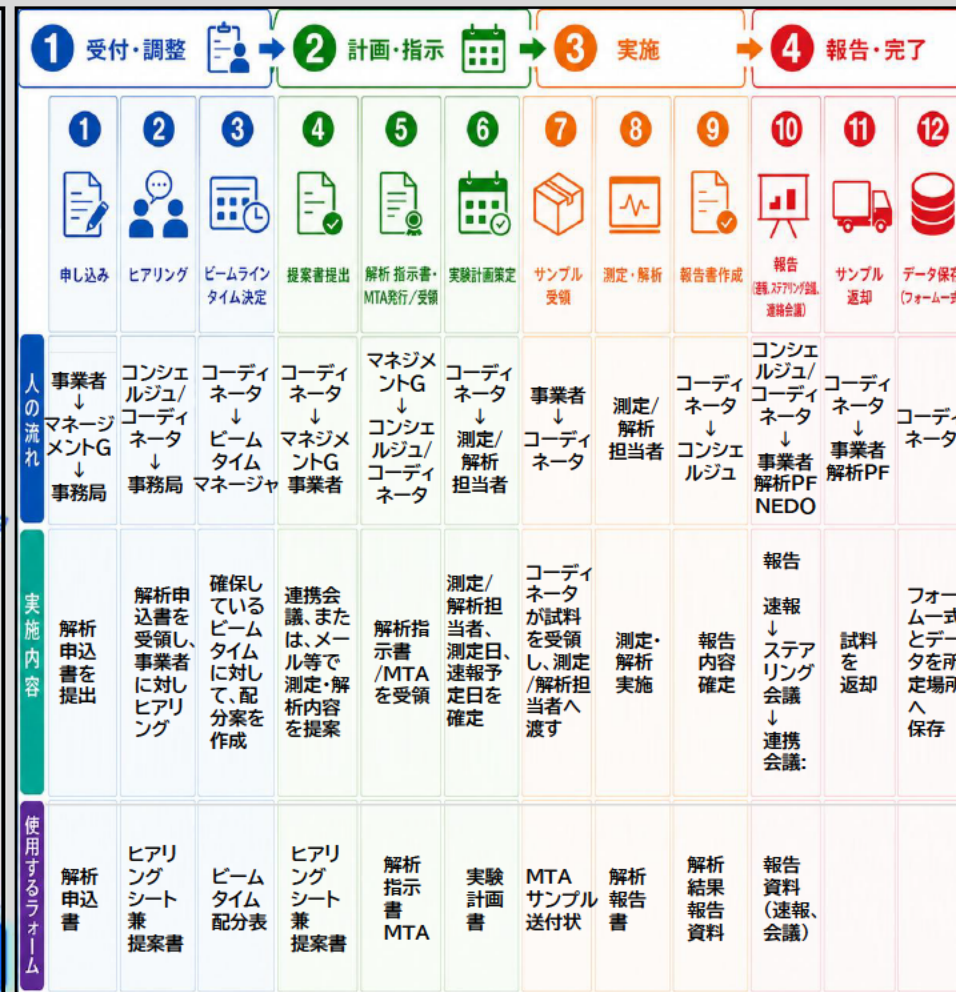
オペランド計測の高度化
DX技術導入



高度解析と電気化学およびDX技術に精通したコンシェルジュとコーディネータを配置し、材料解析の受け入れから、進捗管理、解析結果報告を一元的に管理するサポート体制を構築する

①材料解析支援

- 材料開発目標達成に貢献するため、高い品質の解析をスピーディに届けるフローを設定
- コンシェルジュ・コーディネータが、連携会議でのヒアリング、解析提案、解析結果の報告まで責任をもって実施する体制



コンシェルジュ



Y. Uchimoto (Prof.)



K. Eguchi



Y. Tsuji



T. Uruga

コーディネータ



K. Amezawa (Prof.)



Y. Orikasa (Prof.)



K. Yamamoto (Assoc. prof.)



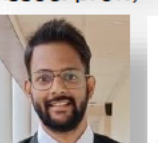
K. Matsumoto (Prof.)



T. Watanabe (Assoc. prof.)



M. Matsumoto N. Thakur



M. Kumar M. Matsumoto



M. Arao



J. Shimanuki T. Kikawa



Y. Zhuang

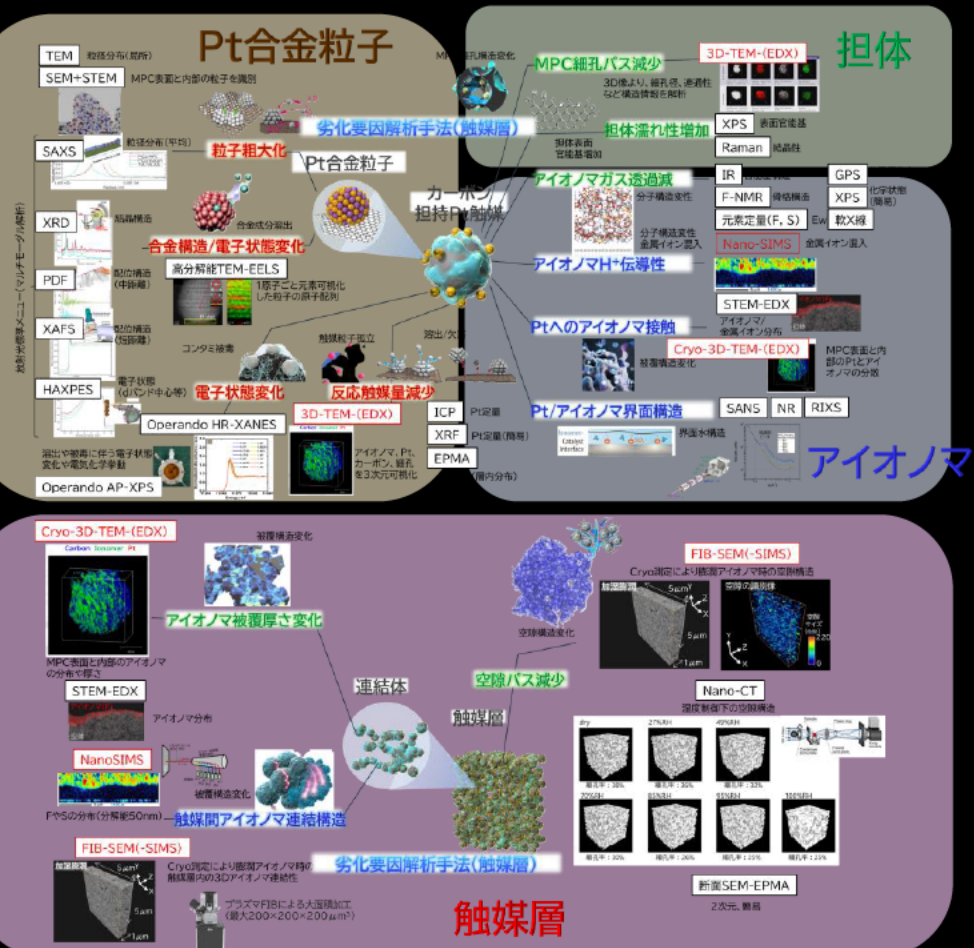


K. Sasakawa

①材料解析支援

- 材料開発課題と解析手法を紐づけた解析プロトコルを整備
- 解析ニーズが高い3D構造解析、アイオノマ分布解析、微量元素分布解析等の技術を重点的に開発
- 解析結果は材料開発へのフィードバックに活用され成果創出に貢献

PEFC性能要因解析プロトコル



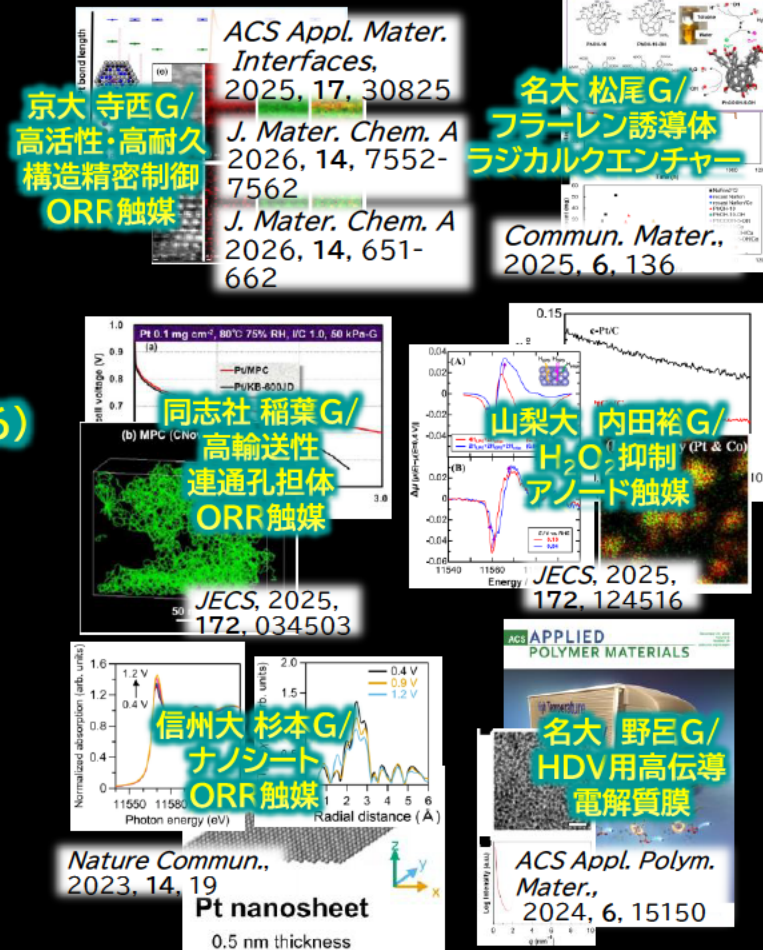
FY25実績

11機関
(FC:8, WE:3)

96検体
(FC:80, WE:16)

20手法

成果創出(論文文化)



②メカニズム解明

- 触媒、電解質膜、セパレータ、ガス拡散層(GDL)、膜電極接合体(MEA)等を開発する材料研究グループの共通課題・ボトルネック課題を対象に、高度解析を活用して現象を原理レベルで解明する。
- 材料特性、界面構造、反応・輸送現象、劣化挙動などを多角的に解析し、性能発現および性能低下の支配因子を明らかにすることで、各事業者の材料開発を支える共通的な技術基盤を構築し、開発期間の短縮と競争力強化に貢献する。
- PEFC/水電解各マネジメントGと協議の上、テーマを設定。

PEFC

有機修飾触媒

1

薄膜電解質膜

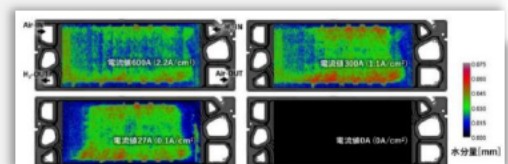
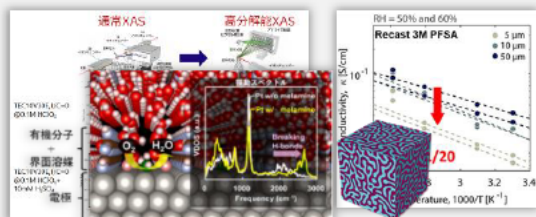
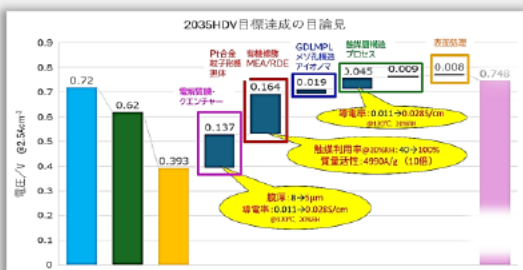
2

セル可視化

3

プロセス解析

4



水電解

PEMWE:

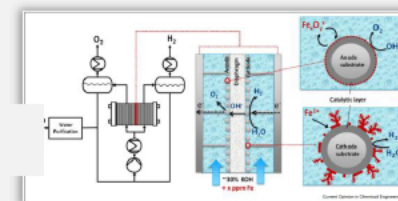
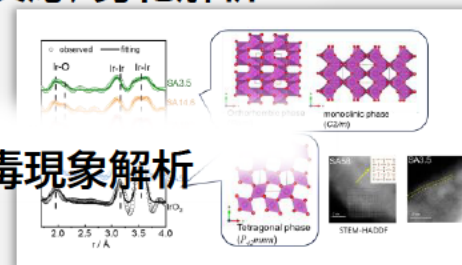
1 IrOx触媒の反応/劣化解析

AEMWE:

2 カソード被毒現象解析

セル可視化

4 プロセス解析



メカニズム解明① 触媒

有機修飾触媒

高度解析により、有機物修飾触媒開発事業者の共通課題/メカニズムを解明

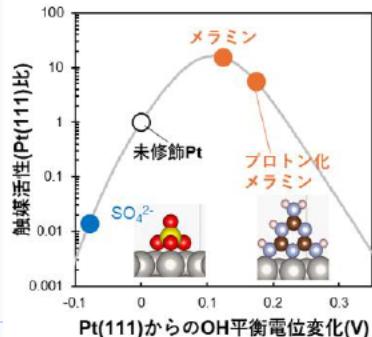
- ✓ 反応機構/界面構造の解析により、触媒活性向上メカニズムを解明し、最大ポテンシャルを予測
- ✓ MEAの現象解明により、成立性、耐久性向上に関する開発方針を提示

01 触媒ポテンシャルの見極め



計算科学による解析

- 表面修飾ORR高活性化機構解明と高活性要件の提示
- ナノ秒界面ダイナミクスと自由エネルギー精密計算, 第一原理化学反応モデル

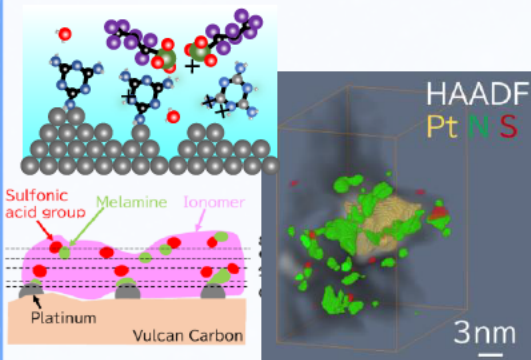


02 界面構造/現象解析



SEIRAS、STEMトモグラフィ

- アイオノマ被毒低減効果



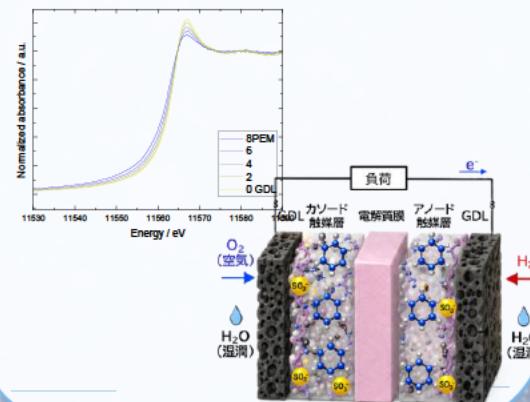
メルアミンが、スルホン酸基と強く結合する

03 MEAの成立性



高分解能XAFS

- RDEで発現する性能を、MEAにおいても成立させる要件を解析

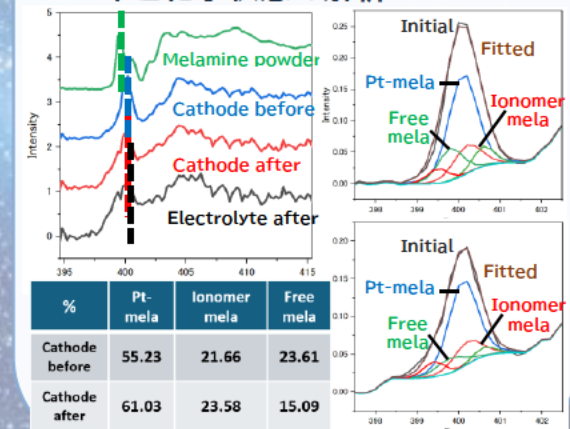


04 劣化機構解析



NanoTerasu

- MEA内の有機修飾成分の分布と化学状態の解析



メカニズム説明② 電解質膜/アイオノマ

薄膜化

電解質/アイオノマにおける伝導度・耐久性向上要因の解明

薄膜電解質膜における高分子相分離構造や界面構造・プロトンチャンネルを捉える
電解質膜/アイオノマの持続性を担保するラジカルエンチャのダイナミクスを可視化

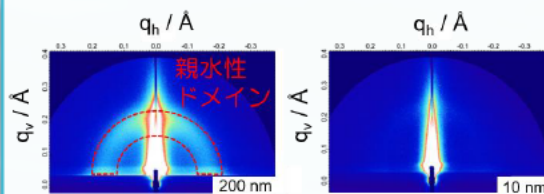


01 SAXS/ GI-SAXS



相分離構造/界面構造

- ナノスケールで界面に形成されるプロトンチャンネルを可視化



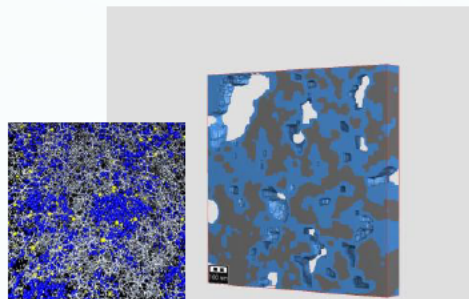
膜厚減少により親水性ドメインが減少

02 プロトンチャンネル 可視化



クライオ電顕

- クライオ電顕によるアイオノマネットワークの可視化
プロトン輸送の直接的理解



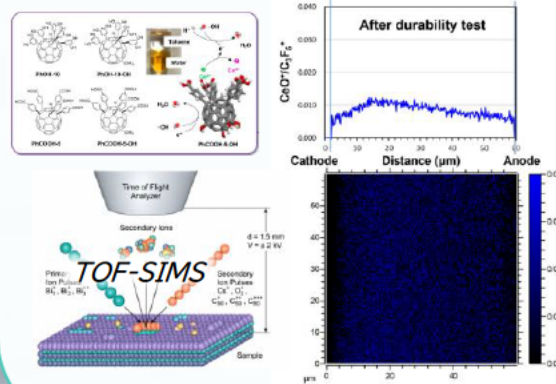
ECS Transactions.,
2013, **58**, 261

03 ラジカルエンチャ 構造



先端機器分析

- 有機物ラジカルエンチャの構造、分布を解析



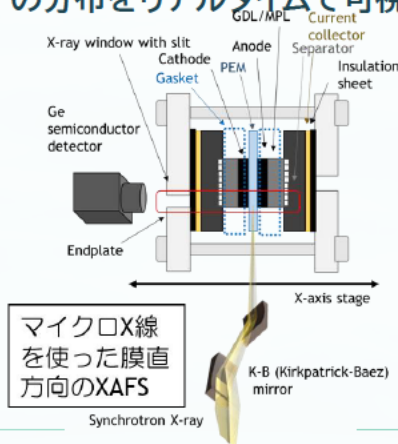
Commun. Mater., 2025, **6**, 136

04 ラジカルエンチャ 分布



Operando μ XRF

- セル動作時のラジカルエンチャの分布をリアルタイムで可視化



メカニズム説明③ セル/プロセス

可視化

セル内現象、触媒層形成プロセスの解析とDXデータ取得

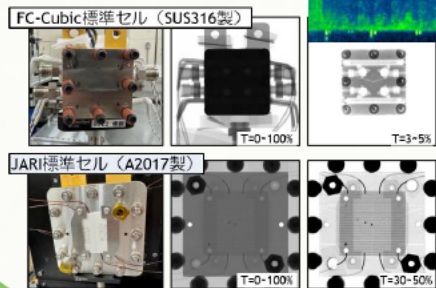
作動中の燃料電池内部の液水の挙動を広い温度条件で観察・評価し、液水が存在できる温度範囲を明確化。
触媒層の製造プロセスにおいて、インクの分散工程におけるカーボン凝集構造とアイオノマ吸着状態の変化、塗布乾燥工程におけるカーボン骨格の形成とアイオノマの析出に対する理解

01 セル内生成水



中性子イメージング

- 高温作動時の燃料電池内部の水の挙動を評価し、水の存在範囲の検証するとともに、流路・GDLの含水状態の温度・湿度マップを作成する



02 触媒インク構造

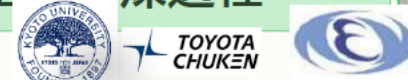


Operando SAXS/SANS

- カーボンとアイオノマの分散・凝集構造の変化を評価
- ロボットを用いて再現性向上およびデータ点飛躍的増

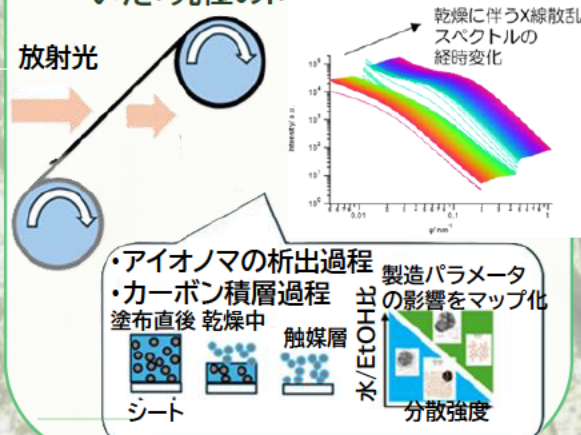


03 塗布乾燥過程



Operando USAXS/SAXS

- インク調製から塗布乾燥までの一気通貫解析により、新規材料を用いた「究極のMFA」の作製

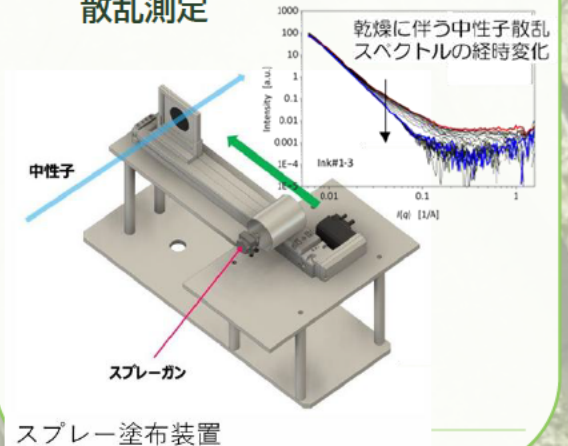


04 塗布乾燥過程



Operando SANS

- J-PARCで製作したスプレー塗布装置でX線・中性子の小角散乱測定



水電解現象解明

性能/劣化

反応機構/分布、および、活性支配因子解明および劣化機構解明

PEMWE、AEMWEにおける活性点、被毒現象、劣化現象の解明
高温水電解空気極の性能向上、空気極および水素極の劣化抑制

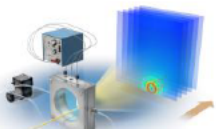
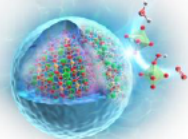
01 PEMWE



放射光マルチモーダル解析

- 活性支配因子、および、劣化機構解明

差分PDF解析後の表面構造情報



オペランドPDF測定の実験概要

Sci. Rep., 2026, 16, 1740

Microstructures, 2026, 6, 2026045

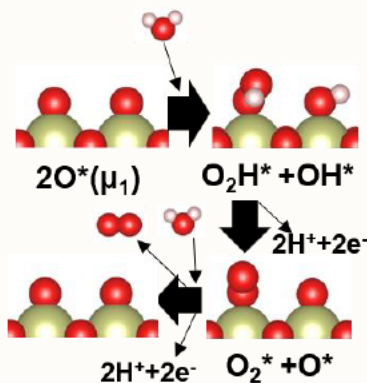
Anal. Sci., 2026, DOI: 10.1007/s44211-026-00917-x

02 PEMWE



計算科学

- OER反応機構解明と高活性触媒要件提示

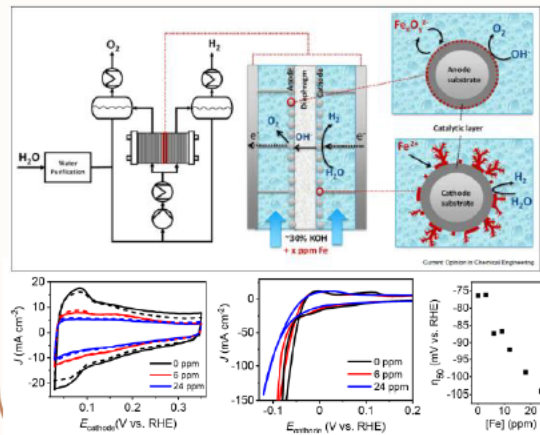


03 AEMWE



カソード被毒現象の解明

- 被毒種の影響解明



ACS Catal., 15, 2847 (2025)

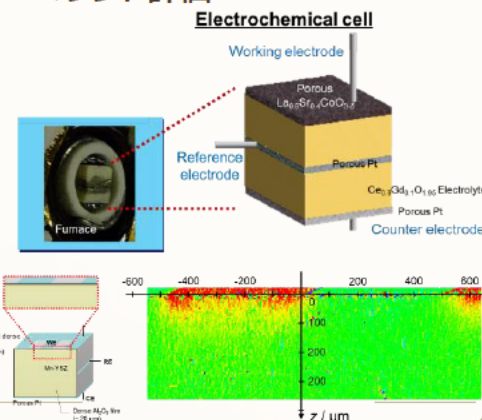
Curr. Opin. Chem. Eng., 42, 100981 (2023)

04 高温水蒸気電解



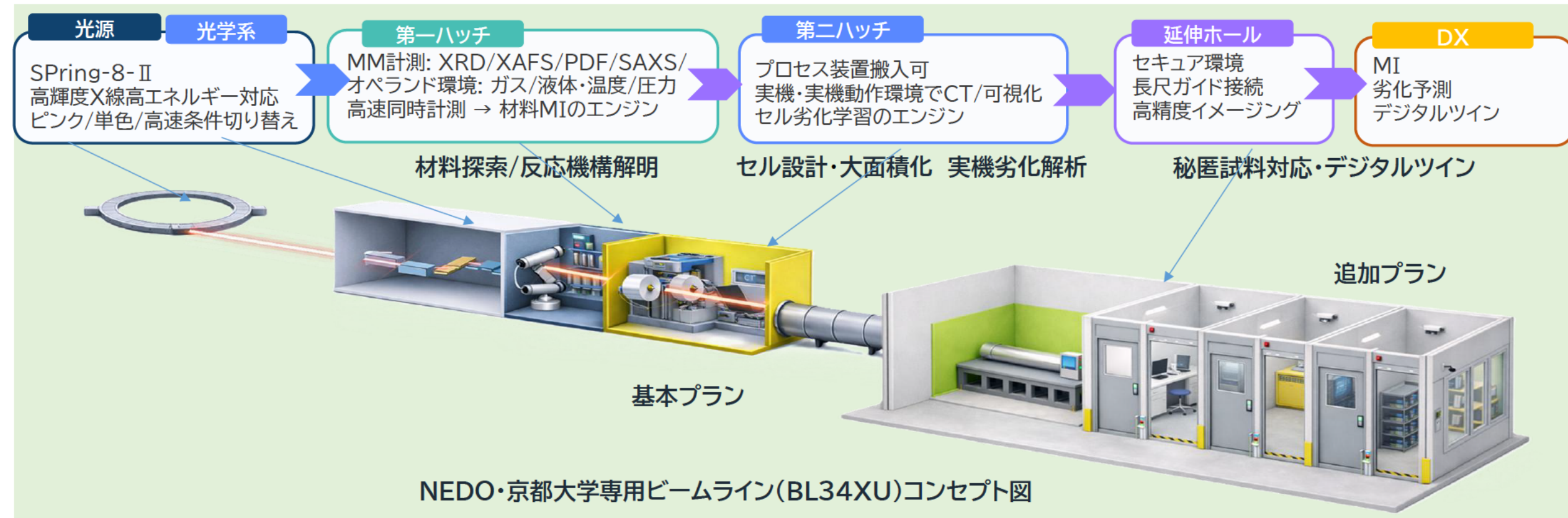
放射光解析

- 高温水電解セルの電極、電解質における反応進行時の μO のオペランド評価



NEDOロードマップ35/40年目標達成を加速するめ、「産業界のうれしさ」と「DX」に全振りした設計

- ◆光源から延伸ホールまでを一体設計し、MM計測/オペランド/プロセス・実機/セキュア高精度イメージングを連結
- ◆世界初のマルチモーダル計測の本格導入 共用施設では分散しがちな「材料・セル・実機・DX」を、専用ビームライン上で連結
- ◆専用ビームラインのため、高い秘匿性保持と妥協のないデータ取得が可能



単なる分析設備ではなく、低コスト化・大型化・耐久性向上を、材料・セル・システムの学習ループで前倒しする開発インフラ
第一ハッチで“なぜ効くか”を解き、第二ハッチで“なぜ壊れるか”、“どうつくるか”を見る

マルチモーダル計測ビームライン

MEI

DXマルチモーダル解析システムの構築と活用

計測インフォマティクス(MEI)による解析高度化
MI・PIと連動する高速大量データの取得



01 ビームライン設計



JASRI



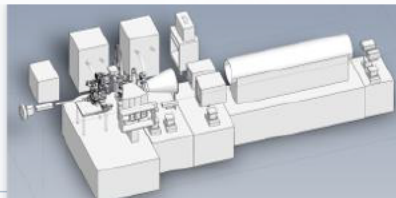
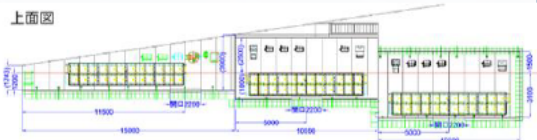
ビームライン設計



材料系・プロセス系のMM計測に

- 必要な実験系を構築し
ロボット等を導入してデータ取得
の高速化する

上面図



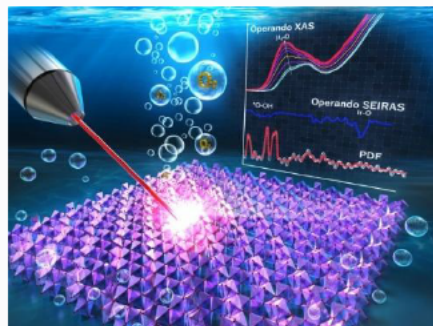
02 フィジビリティスタディ



マルチモーダル計測

複数の高度解析と理論計算を組

- み合わせたマルチモーダル解析に
よってIrを含む酸化物のOER活
性を支配する因子の解明



J. Am. Chem. Soc., 2025, 147, 30613

03

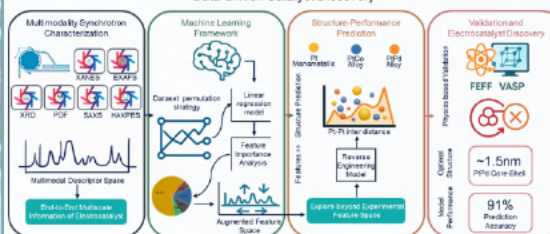
計測高速化/ 自動化



マルチモーダルスペクトル解析

- 機械学習を用いて特徴量と触
媒性能の関係をモデル化

Machine Learning-Guided Multimodal Synchrotron
Analysis Workflow for Fuel Cell Electrocatalyst Discovery
Data-Driven Catalyst Discovery



Commun. Chem., 2025, 8, 376

04

解析高速化 高度化



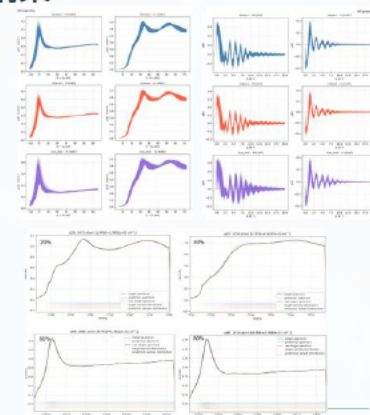
触媒解析の完全な自動化

- スペクトルデータベース構築と
データベースを用いた予測モ
デル構築

Core-Shell
粒子



ランダム



	論文	学会・講演	プレス発表	受賞
件数	12	31	2	1
論文				
K. Liao et al., J. Mater. Chem. A, 14, 651 (2026)				
K. Liao et al., ACS Appl. Mater. Interfaces, 18, 11298 (2026)				
K. Kobayashi et al., Sci. Rep, 16, 1740 (2026)				
R. Merkle et al., Solid State Ion., 441, 117166 (2026)				
K. Mizuno et al., Solid State Ion., 441, 117194 (2026)				
N. Thakur et al., J. Am. Chem. Soc., 147, 30613 (2025)				
A. Baliyan et al., Commun. Chem., 8, 376 (2025)				
Y. Gao et al., ACS Appl. Mater. Interfaces, 17, 30825 (2025)				
K. Liao et al., ACS. Appl. Nano Mater., 8, 23991 (2025)				
W. Cao et al., Catal. Sci. Technol., 15, 4130 (2025)				
T. Matsumoto et al., Appl. Sci., 15, 3931 (2025)				
学会・講演				
(Invite) Y.Orikasa et al., Operando Micro-Focused XRF Visualization Reveals through-plane Ir and Pt Dissolution Mechanisms in PEM Water Electrolyzers, 249th ECS Meeting, 2026,5.				
(Invite) M. Kumar et al., Unified Mechanistic Insights into Oxygen Evolution Reaction Catalysts Revealed by Multi-Modal Operando Spectroscopy, 249th ECS Meeting, 2026,5.				
他 29件				
プレス発表等				
「マルチモーダル放射光計測 × 機械学習により燃料電池触媒探索を革新」 FC-Cubic				
「マルチモーダル解析で酸素発生反応(OER)の鍵を握る“活性点”を特定」 京都大学				
受賞				
「2026年電気化学会論文賞受賞」 曹、THAKUR、KUMAR、松本、佐藤、寺西、今井、内本				

査読論文:12報

Machine Learning-Guided Multimodal Structure-Activity Relationship in PtCo L10 Ordered Phase ORR

プレス発表

マルチモーダル解析で酸素発生反応（OER）の鍵を握る“活性点”を特定：酸化イリジウム触媒の構造が高性能の秘密を握る
～ 水電解によるグリーン水素社会実現へ新たな一歩 ～

京都大学大学院人間・環境学研究科 Neha Thakur 博士研究員、内本喜晴 同教授らの研究グループは、田中貴金属工業株式会社、技術研究組合 FC-Cubic、横浜国立大学、九州大学、奈良女子大学、島根大学、立命館大学と共同で、水を電気分解して水素を製造する水電解の鍵となる酸素発生反応（OER）において、酸化イリジウム触媒の高い活性の起源を解明しました。

本研究の概要図。電位を印加した状態、つまり、水電解が起こっている際の酸化イリジウム表面の構造を X 線によってマルチモーダルに分析する様子を表現している

2026年電気化学会論文賞受賞

電気化学会 第93回大会

マルチモーダル放射光計測 × 機械学習により燃料電池触媒探索を革新
—放射光スペクトルから性能と構造を“逆予測”する世界初のワークフローを開発—

技術研究組合FC-Cubic（パリアン アンクル主任研究員、今井英人部長）、国立大学法人京都大学（内本喜晴教授）、公益財団法人高輝度光科学研究センターの研究グループは、世界初となる固体高分子形燃料電池に用いられる触媒について、性能と構造を同時に推定し、さらに最適構造を逆予測できる「マルチモーダル放射光計測×機械学習」ワークフローを開発しました。

Machine Learning-Guided Multimodal Synchrotron Analysis Workflow for Fuel Cell Electrocatalyst Discovery

Multimodal Synchrotron Characterization: XAS, EXAFS, PDF, SAXS, HAADF

Machine Learning: Dataset generation, Feature extraction, Model training, Validation

Structure-Performance Prediction: Monoclinic, P4_123, P4_123

Validation and Electrochemical Discovery: FFFT, VASP, ~1.5nm PVP Core Shell, 91% Prediction Accuracy

- 燃料電池および水電解技術の2035年開発目標の実現に向けて、燃料電池や水電解における複雑な現象の理解を深化させ、材料およびシステムの飛躍的性能向上に係る研究開発に貢献する。

