

発表No.A1-10

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/共通課題解決型基盤技術開発
/マテリアルズ・インフォマティクスによる燃料電池材料
の研究開発

袖山慶太郎

物質・材料研究機構

2023年7月13日

連絡先：
物質・材料研究機構
(SODEYAMA.Keitaro @nims.go.jp)

事業概要

1. 期間

開始 : 2020年8月

終了（予定） : 2025年3月

2. 最終目標

NEDO燃料電池ロードマップにおける2030年以降に目指すべき目標達成に向けて、革新的な新規材料開発のための指針提案を行うことを目的とする。

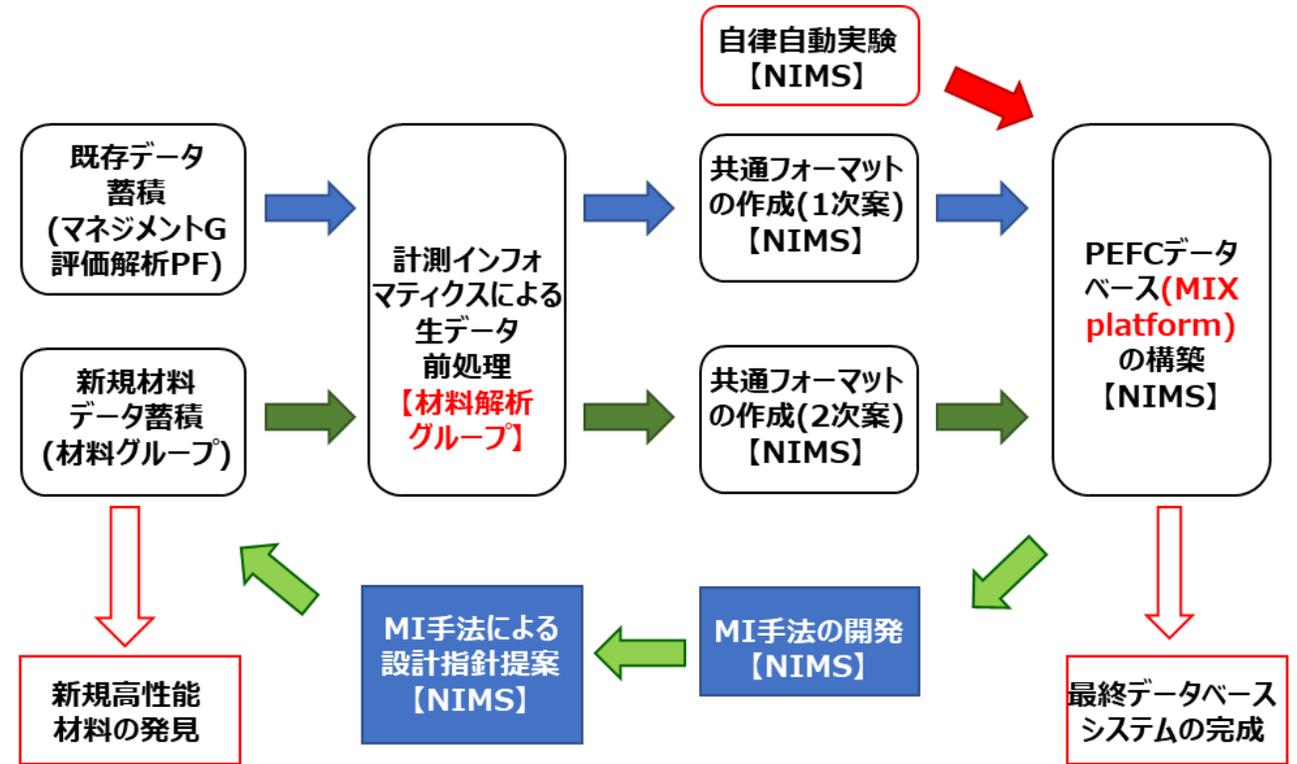
そのために以下を実施する。

- ・ これまでに得られている知見を集約し、新規データを蓄積する。
- ・ データ蓄積のために、自動自律探索実験を実施する。
- ・ 上記DBとMI解析を用いた指針提案法のノウハウを蓄積する。

3. 成果・進捗概要

- ・ 新規データ蓄積のためのデータベースと、それを利用するためのプラットフォームを構築、機能追加した。
- ・ 自動自律探索実験の装置を導入し、設定を実施している。
- ・ 上記DBとMI解析を用いた指針提案を、材料研究グループと共同で実施し、成果を得た。

1. 事業の位置付け・必要性



- ①材料研究Gr.およびPFのデータを蓄積し、PEFCに関する共通フォーマットに基づいたデータベースPFを構築する。
- ②自律自動実験を実施し、データを蓄積すると共に高性能材料の設計指針を得る。
- ③DBを利用したMI解析を実施し、設計指針提案を含むノウハウを構築する。

2. 研究開発マネジメントについて

- A) 材料改良方針
- D) 革新材料創生

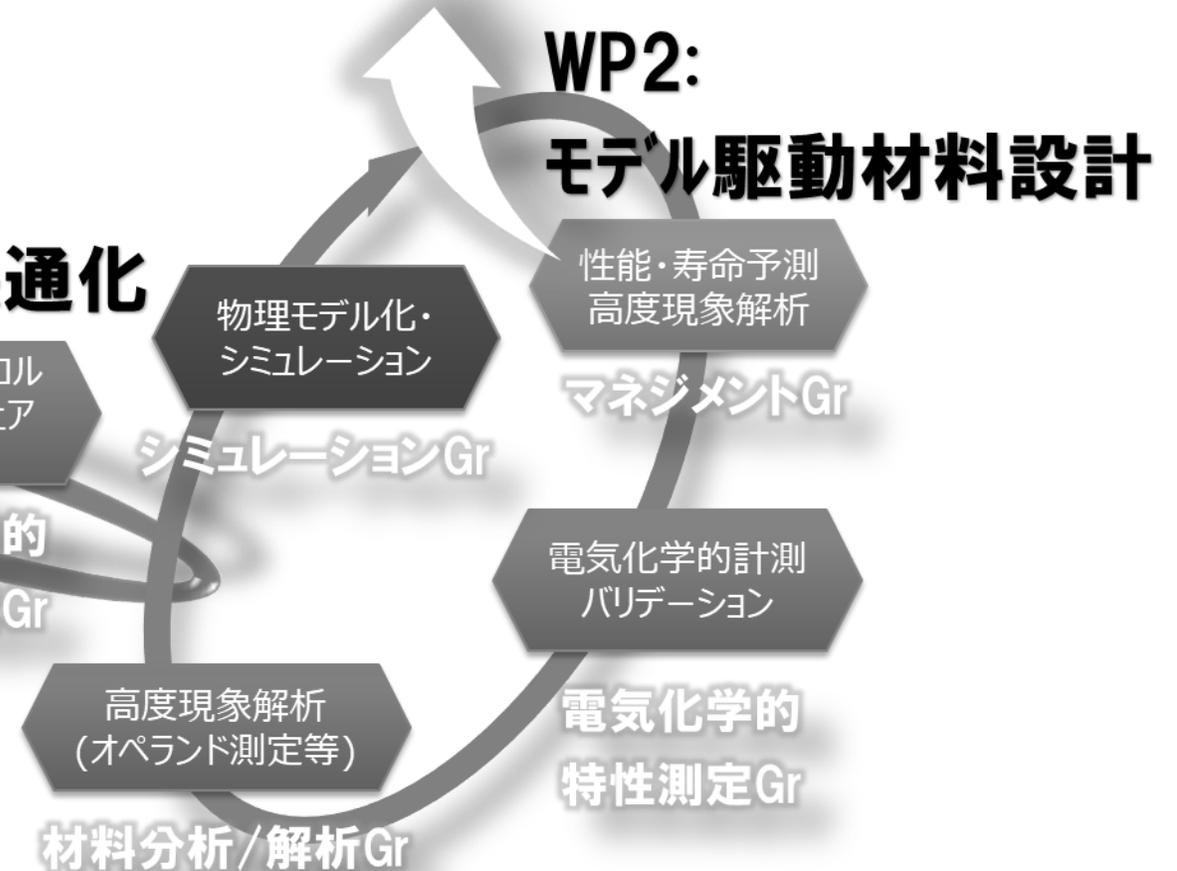
- B) 現象の可視化
- C) 現象の予測
- D) 革新材料創生

WP1: データ駆動材料設計



WP3: 評価共通化

評価プロトコル / ハードウェア 共通化
電気化学的 特性測定Gr

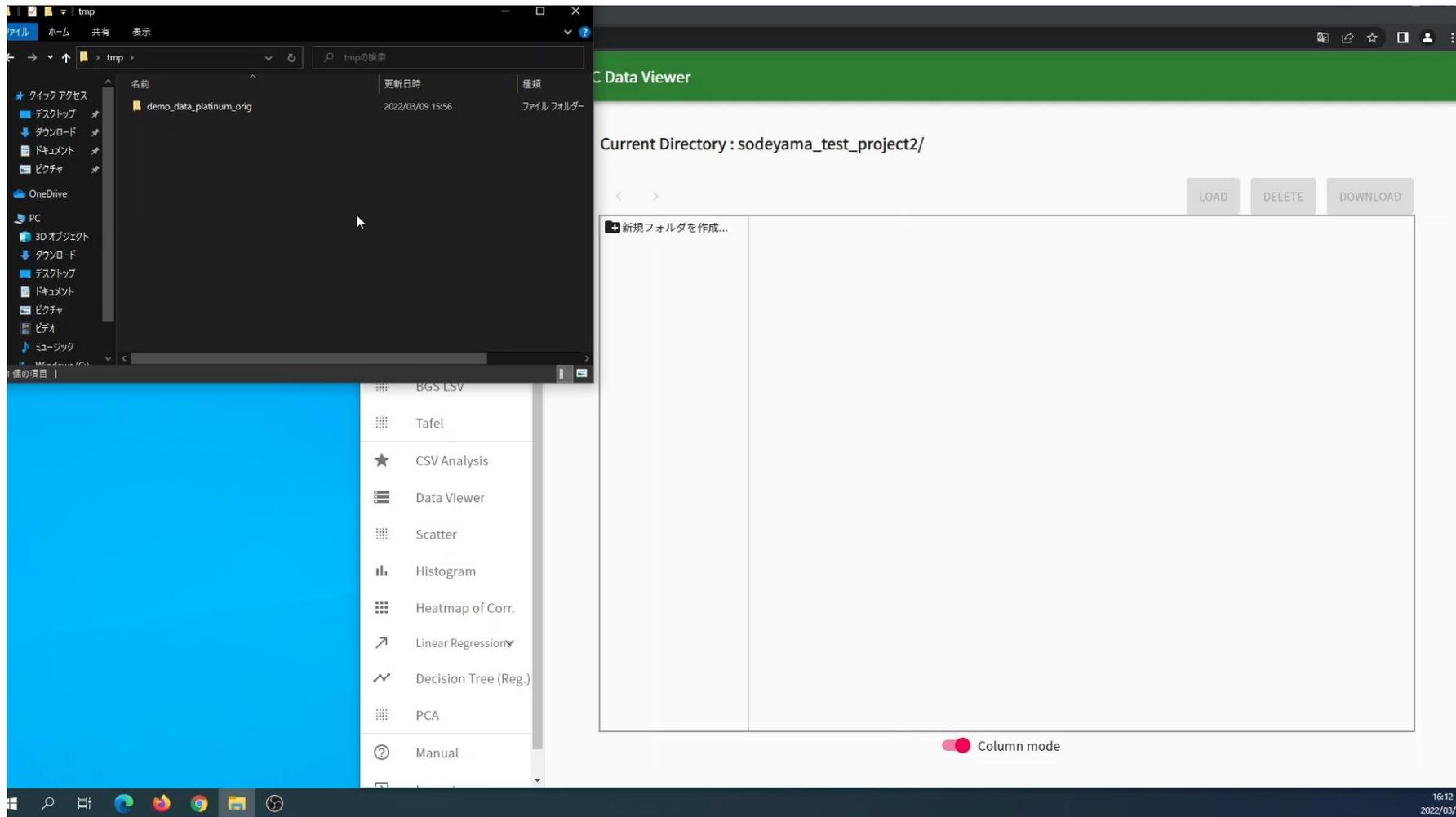


3. 研究開発成果について

- 共通フォーマットに基づく系統的PEFCデータベース構築とウェブアプリの実装

- ・実用化を見据え、誰もが簡単に共通フォーマットを保持してデータを蓄積できる必要あり。
⇒共通フォーマットに変換してデータをアップロードするためのウェブアプリを昨年度実装した。⇒蓄積データ増加中。

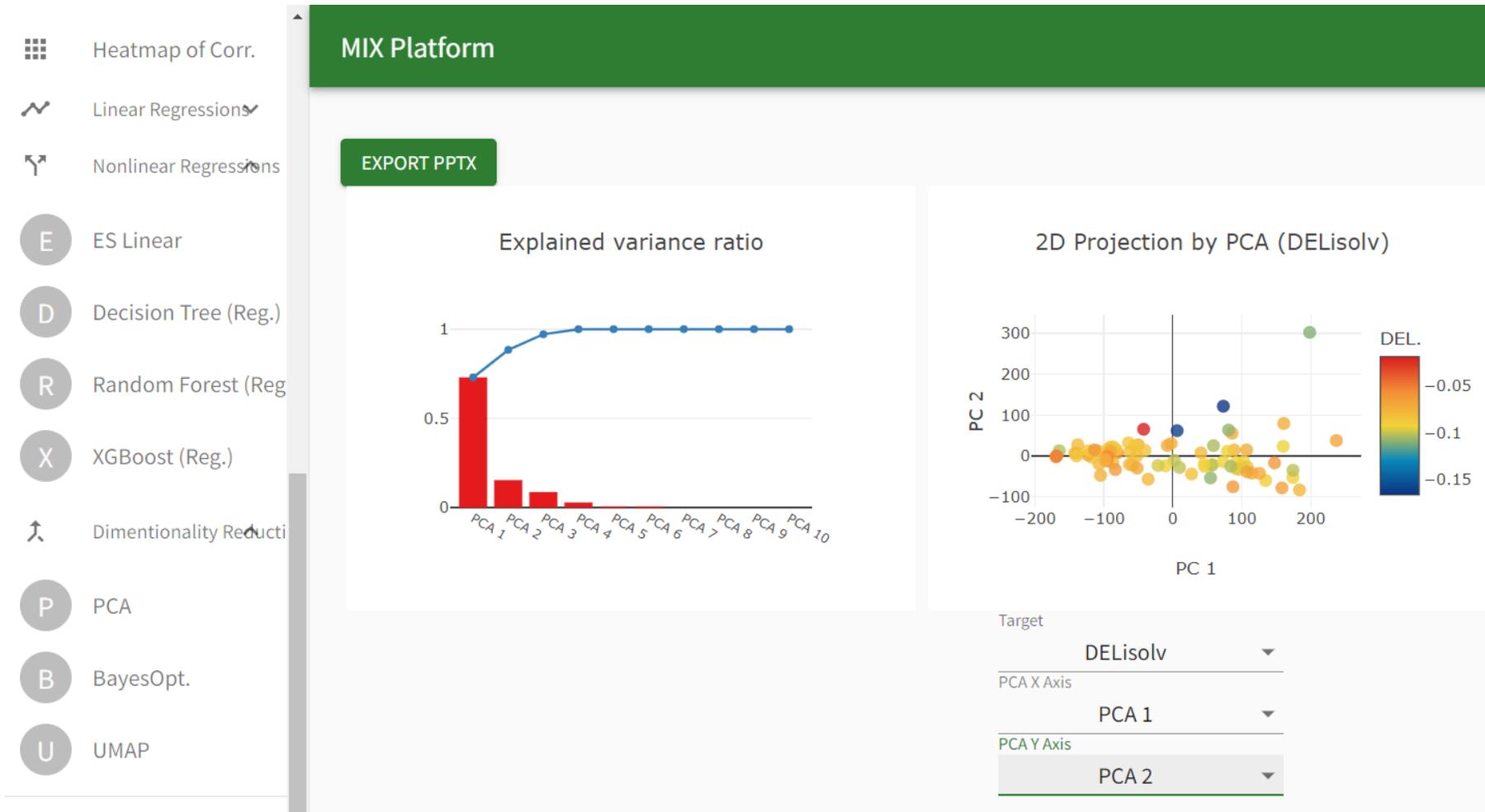
ウェブアプリ：ウェブブラウザからURL(https://***)によりアクセス可能



3. 研究開発成果について

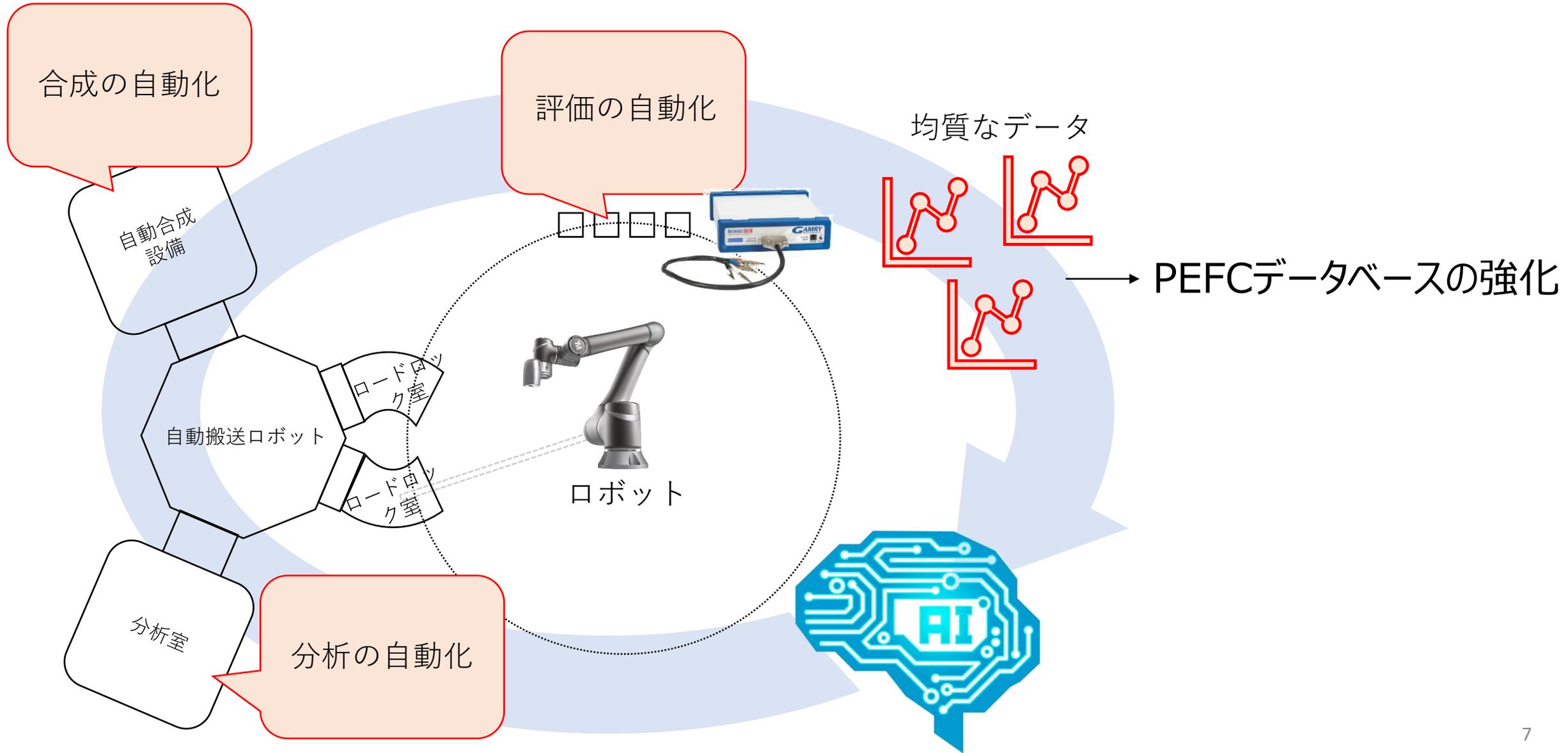
- MI解析による指針提案（MI解析手法の機能追加）

- ・アップロードしたデータに対するMI解析を実施できる機能が昨年度までに実装されている。
⇒さらに非線形回帰モデルや主成分分析などの機能を追加実装した。



3. 研究開発成果について

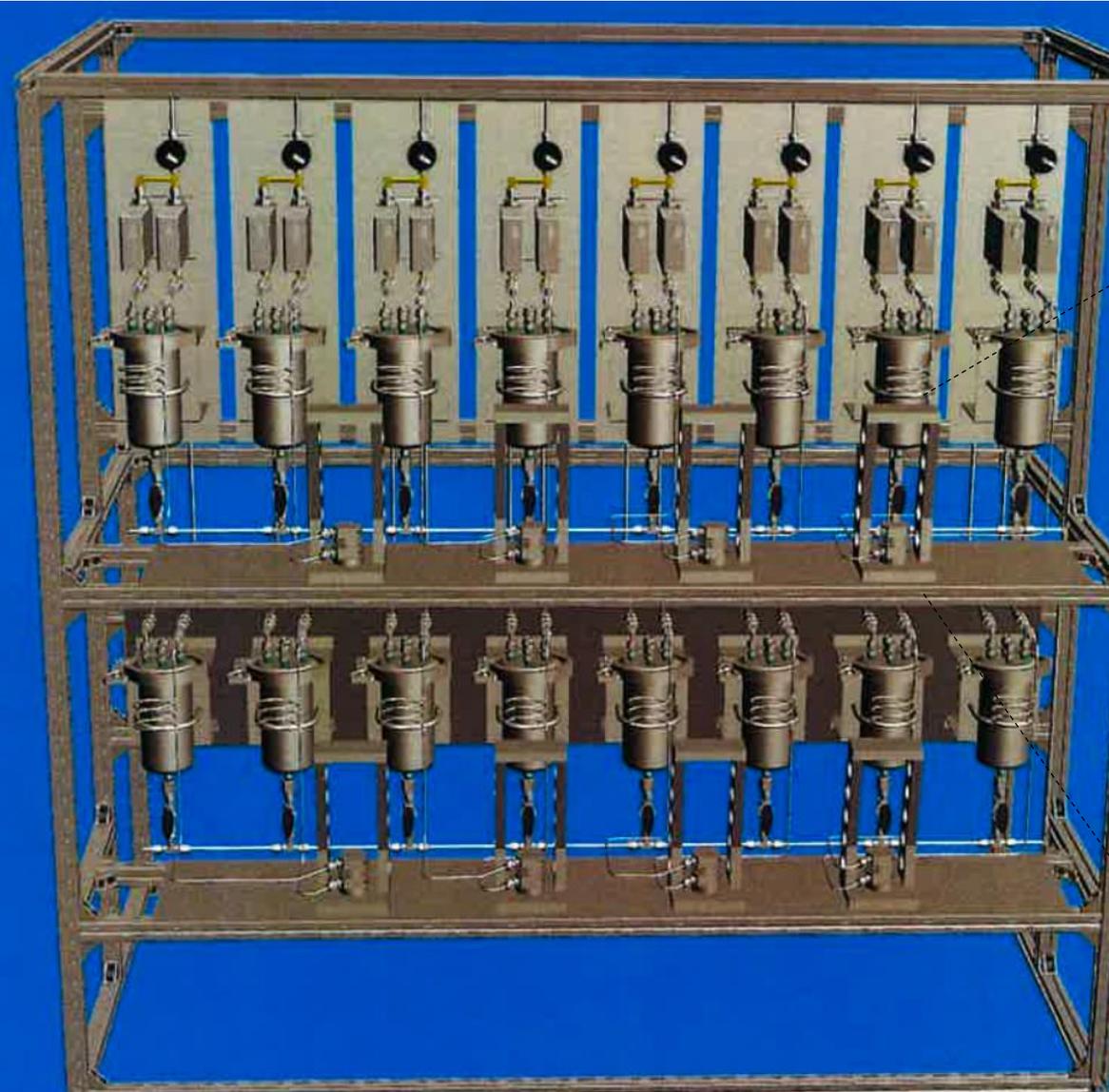
- 自律自動実験によるデータ蓄積 均質なデータの自動収集を実施。



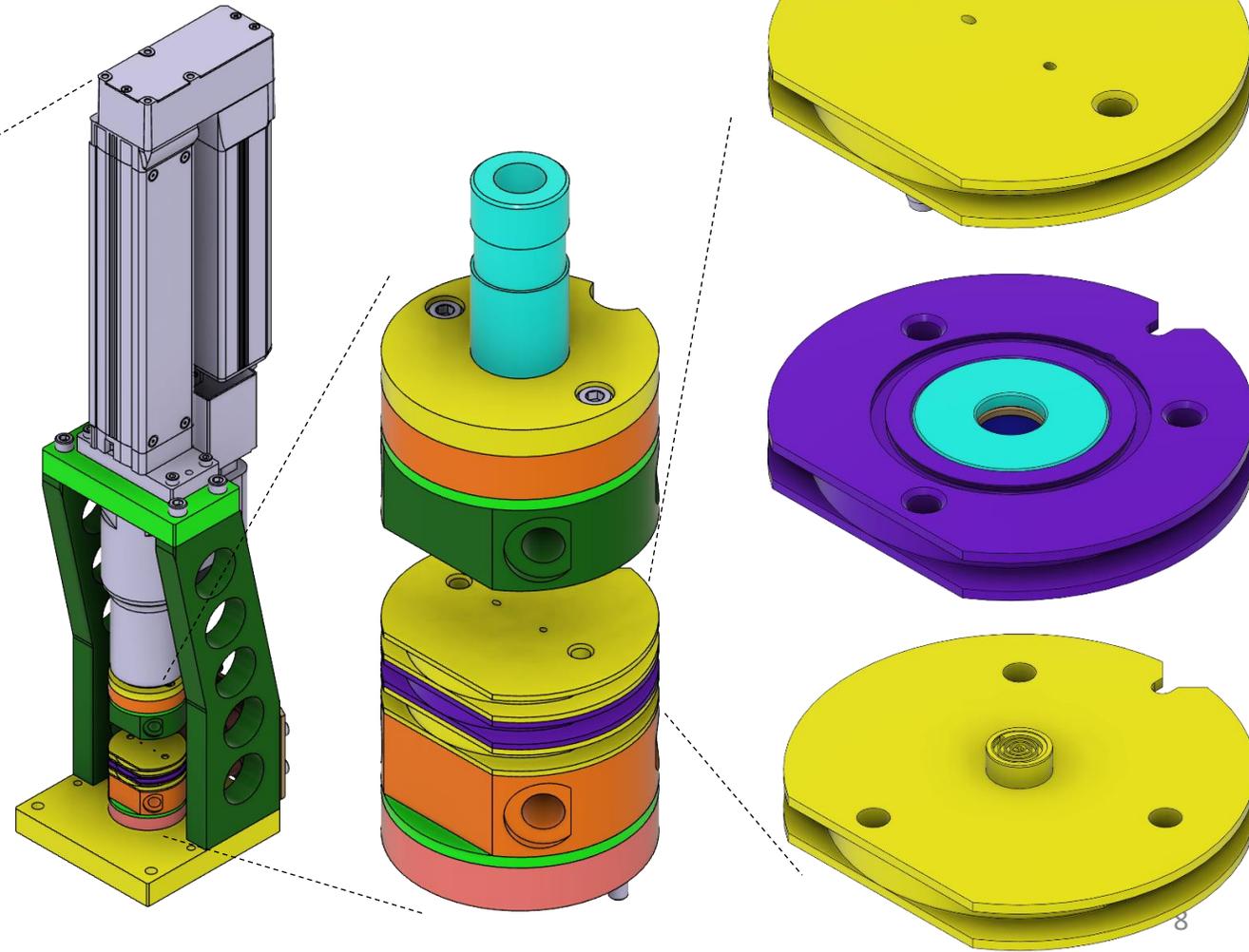
3. 研究開発成果について

- 自律自動実験によるデータ蓄積

ガス制御システム



自動評価用セルは納品され、圧力を計測しながら押し付けが可能なサーボプレスも納品済み



3. 研究開発成果について

- 材料研究グループとの共同研究による、非白金水素酸化触媒の組成探索（北大 加藤先生グループ）

- ・非白金触媒の**アクティブラーニング**による探索 ⇒ 1. 触媒活性を最大化、2. 白金量を最小化

31種の多元合金触媒の実験データ（活性）

目的変数： current densities @ 0.02 V vs. RHE
(Ptの使用量を減らす)

説明変数（制御変数）：合金に使う金属元素の量

Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga
Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In
Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl

新規触媒の
合成（4種）

Active leaning loop x3
(Bayesian optimization)

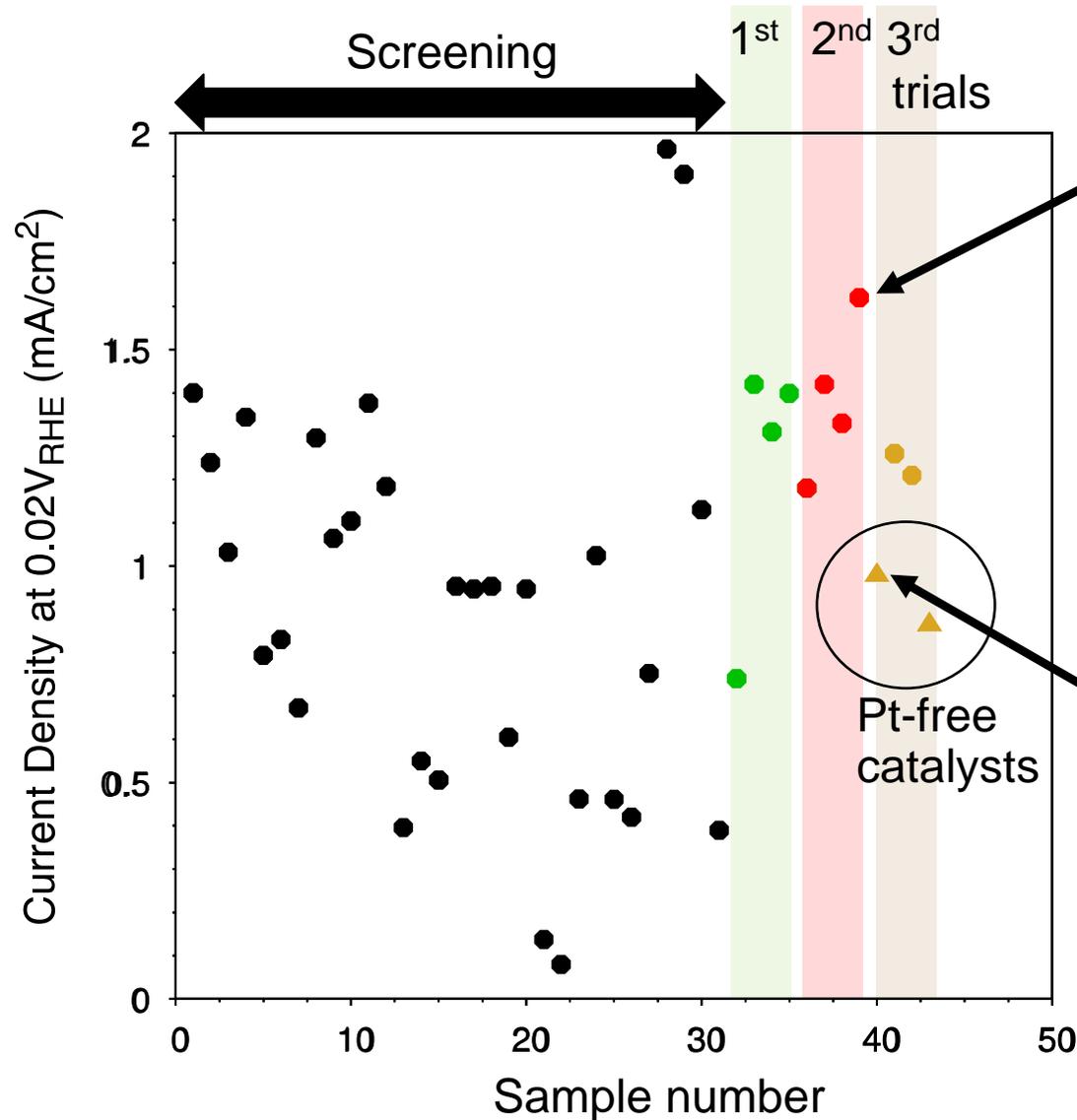
新規材料のMIに
よる提案（4種）

触媒活性の高い、非白金触媒の探索
(まずはPtを含むものから探索)

3. 研究開発成果について

- 材料研究グループとの共同研究による、非白金水素酸化触媒の組成探索

・非白金触媒のアクティブラーニングによる探索 ⇒ 1. 触媒活性を最大化、2. 白金量を最小化



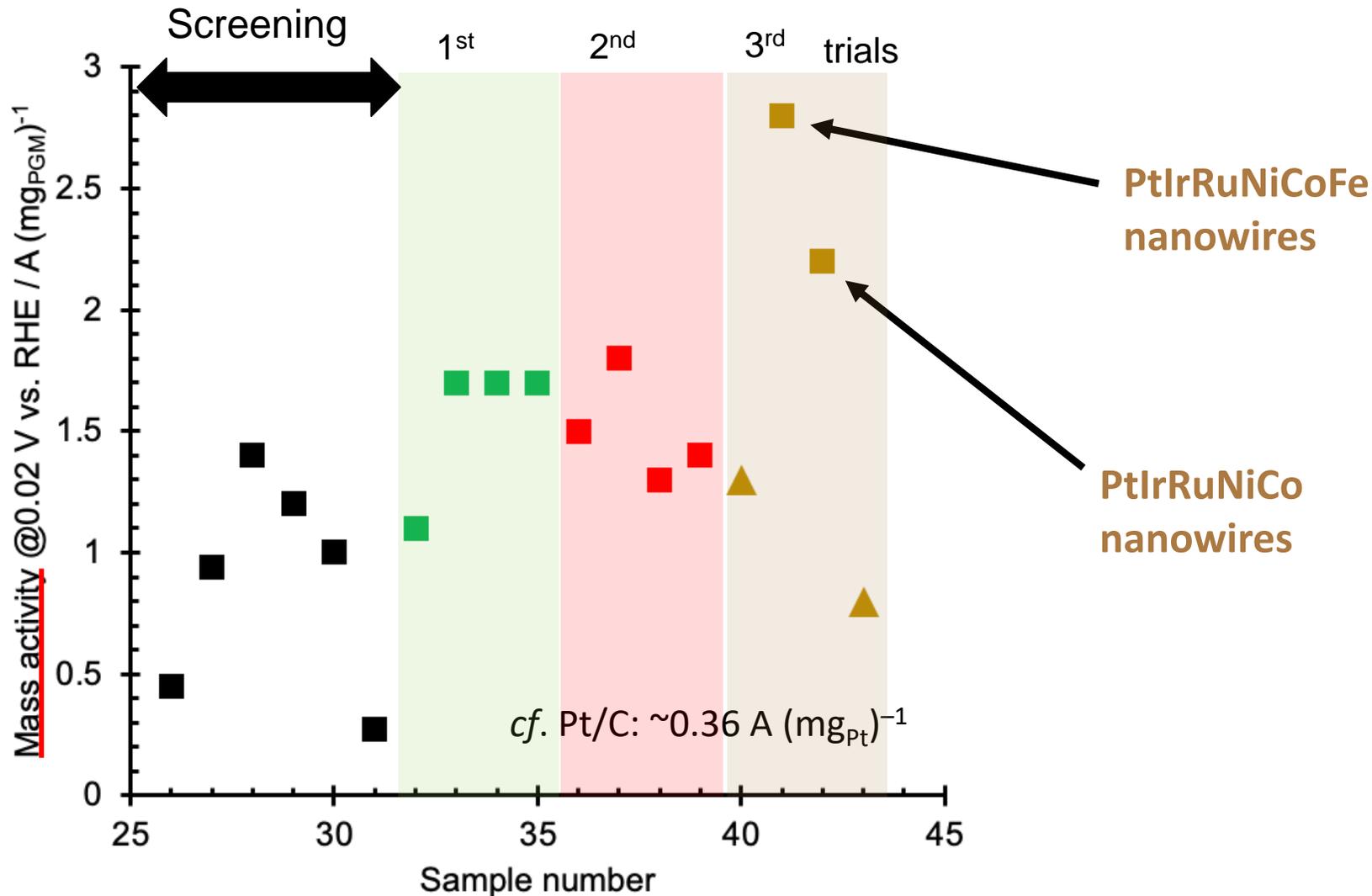
Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga
Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In
Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl

・非白金触媒で活性があるものを実験的に探索した。

3. 研究開発成果について

- 材料研究グループとの共同研究による、非白金水素酸化触媒の組成探索

・非白金触媒のアクティブラーニングによる探索 ⇒ 1. 触媒活性を最大化、2. 白金量を最小化



Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga
Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In
Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl

・白金触媒であるが、MAが高いものも探索できた。

4. 今後の見通しについて

- **実用化・事業化のイメージ（成果がどのように使われるか）**

本事業で構築したPEFC データベースを用い、本事業で得たMI解析のノウハウを利用することで事業者が独自にMI解析を行い、新材料探索の指針を得ることができる。

- **実用化・事業化に対する今後の課題と対応方針**

作成したデータベースを事業終了後にどのように扱うかを決める必要がある。

- **実用化・事業化に向けた具体的な取り組み（計画や戦略等）**

作成したデータベースおよびMI解析プラットフォームをより利用しやすく改修する。

- **その他、顕著な経済・技術・社会的な効果、人材育成の取り組み等**

基本的なMI解析手法が自由に利用できるようなプラットフォームになっているため、これを用いたMI解析の実習が可能であり、研究者のスキルアップに貢献できる。