

# NEDO水素・燃料電池成果報告会2022

発表No. A1-6

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  
評価解析プラットフォームマネジメント



竹内 仙光\*

\*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

2023年7月13日

連絡先: 技術研究組合FC-Cubic 竹内  
n-takeuchi@fc-cubic.or.jp

# 事業概要



1. 期間 開始：2020年5月 終了（予定）：2025年3月

## 2. 最終目標

| 研究開発テーマ                      | 最終目標（2024年度）  |
|------------------------------|---|
| プラットフォーム構築                   | 材料開発者の評価解析プラットフォームの活用を通じて、2030年のPEFCスタック性能目標の達成を見通すことができるPEFCの材料候補を創出することに貢献する。                             |
| 材料研究マネージメント<br>電気化学評価マネージメント | スタックの部材、セル等の評価結果の情報集約により、現状の商品化技術の到達レベル、それを実現する材料、部材の物性等を明らかにし、材料開発テーマのベンチマークを行うとともに、必要に応じて目標値や戦略立案への貢献を行う。 |
| スタックシミュレーターとMIの<br>マネージメント   | 多様なPEFCのアプリケーションのシステム要求からスタックを構成する材料開発の指針が簡易的に検討することができ、最終的にシステムまでを含めたモデル駆動による材料設計を可能とするMBDの基盤技術を確立する       |
| 技術ロードマップの調査・整理               | 2040年以降の燃料電池車ほか多用途展開を鑑みた技術ロードマップと取り組むべき戦略の方針を整理し公開する。   |
| 技術のオープンコミュニティー化と<br>研究土壌の醸成  | 1～2ヶ月に1回程度のオープンシンポジウム等を開催する。PEFCの研究開発動向調査を総括し、材料開発を加速させるためのプラットフォームの本格運用、計測・解析技術の産業界への普及、更なる高度化に向けた指針を提示する。 |

## 3. 成果・進捗概要

| 研究開発テーマ                      | 成果・進捗概要   |
|------------------------------|---|
| プラットフォーム構築                   | 4つのプラットフォーム(評価解析・課題共有・人材育成・モノづくり)を構築し、NEDO事業者の研究開発に貢献   |
| 材料研究マネージメント<br>電気化学評価マネージメント | 評価解析プラットフォームとしてNEDO事業者のサンプル評価・材料解析結果のフィードバックにより、事業者の研究開発に貢献                                       |
| スタックシミュレーターとMIの<br>マネージメント   | スタックシミュレーター(FC-DynaMo)、マテリアルインフォマティクス(MIX-Platform)の構築をサポートし、ワークショップを通じて講習会・OJTを実施し習得をサポート。       |
| 技術ロードマップの調査・整理               | 2040年の商用車(HDV)のほか多用途展開を鑑みた技術ロードマップと取り組むべき戦略の方針を整理し公開。   |
| 技術のオープンコミュニティー化と<br>研究土壌の醸成  | 計11回のオープンシンポジウムを開催し、PEFCの研究開発動向調査を総括し、材料開発を加速させるためのプラットフォームの本格運用、計測・解析技術の産業界への普及、更なる高度化に向けた指針を提示。 |

# 1. 事業の位置付け・実施体制



## FC-Platform

- 【評価解析PFマネジメントGrの役割】
- NEDO事業の材料研究テーマが開発した材料を共通のプロトコルで評価し、目標の達成に向けた**改良方針をフィードバック**
  - 共通基盤となる**新しい計測解析・予測技術**を開発し、産業界・アカデミアへ普及・活用
  - PFのサービスを広く提供することで、燃料電池に縁が薄かった材料研究者を掘り起しPEFC研究開発への**新規参画を促進**

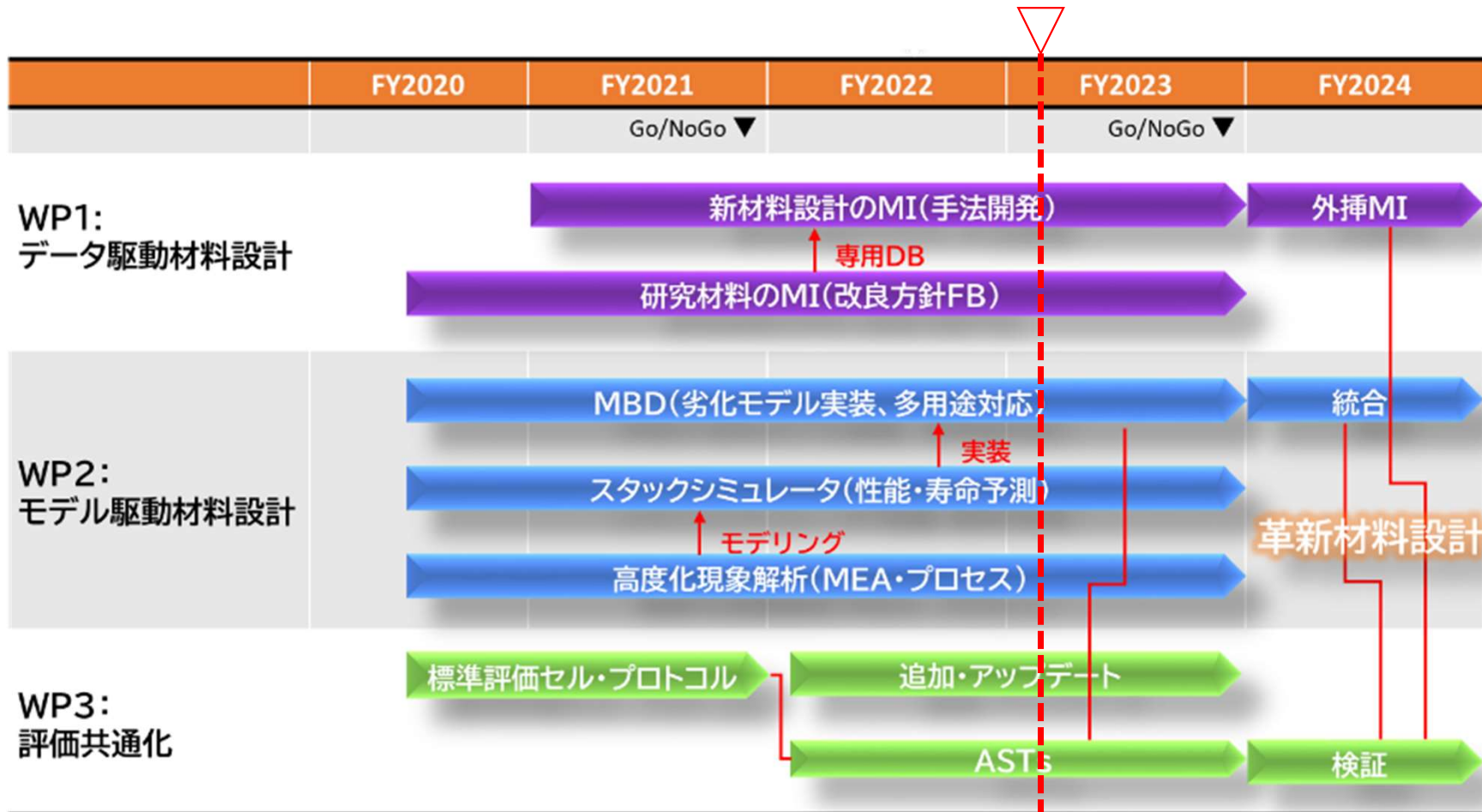
## 2. 研究開発マネジメントについて

### FC-Platformアウトプットとスキーム



3つのWPで研究開発に貢献していく

## FC-Platform活動計画



5か年計画の4年目 立ち上げから**定着**→**発展**へ

### 知財戦略・標準化への取り組み

➤ 知財

FC-Platformは、基盤技術とそれを用いたサービスのオープンプラットフォームを目指すので、積極的に特許出願しない戦略

➤ 標準化

- 一般評価プロトコルおよびハードウェアの国内標準化を推進
- 大型商用モビリティ（HDV）の加速耐久評価プロトコルは、米欧国際連携を通じ世界標準化を協議中

### 3. 研究開発成果について

## FC-Platform活動 成果



# MIRAI セル MEA解析

## WP3 評価共通化

20万km走行MIRAI(Gen1)のセル解析進捗

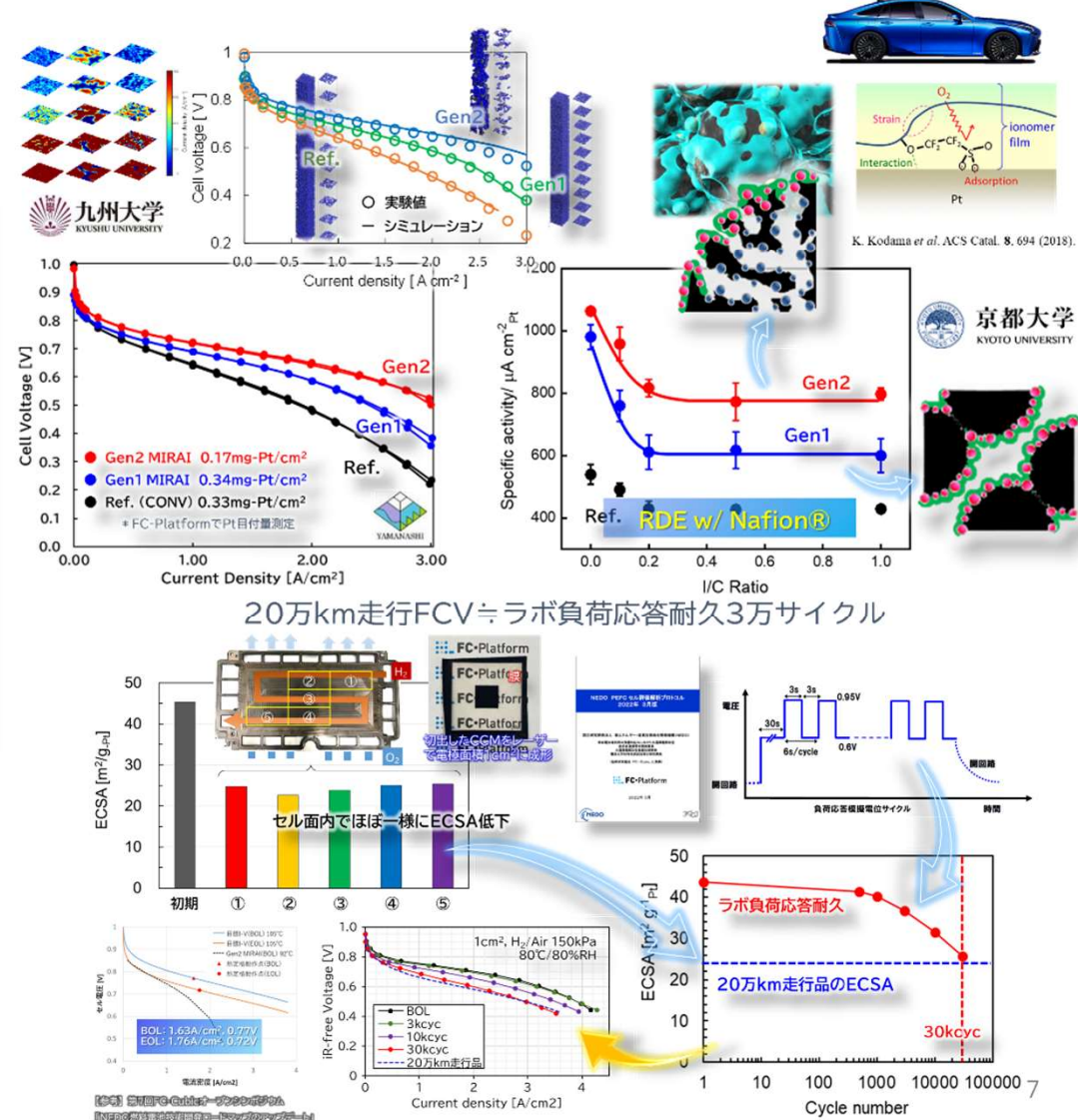
社外走行20万kmのGen1 MIRAI試験車両から回収した実機セルを分解調査

トヨタ自動車(株)からFC-Platformに特別供試



| 部位   | 区分     | 分析法          | 内容              | DOE(2018)      | NEDO(2022) |   |
|------|--------|--------------|-----------------|----------------|------------|---|
| セル   | 放射光    | ラミネグラフィ      | セル内部構造(3D)      |                | ●          |   |
|      |        | X線CT         | セル内部構造(2D)      | ●              | ●          |   |
|      | ラボ     | XRFイメージング    | Ce面内分布          | ●              | ●          |   |
|      |        | XRD          | PtCo合金構造        | ●              | ●          |   |
| 電解質膜 | 放射光    | HAXPES       | 触媒粒子の電子状態       | ●              | ●          |   |
|      |        | PDF          | 触媒粒子の短中距離構造     | ●              | ●          |   |
|      |        | SAXS         | 触媒粒径分布          | ●              | ●          |   |
|      |        | Ex-situ XAFS | 触媒粒子の配位構造       | ●              | ●          |   |
|      |        | operand XAFS | 5d空孔数(酸化)変化     | ●              | ●          |   |
|      |        | 軟X線 XAFS     | 触媒層の吸着構造        | ●              | ●          |   |
|      |        | 高分解能XANES    | 吸着挙動            | ●              | ●          |   |
|      |        | 中性子          | SANS            | 触媒層内アイソマー構造    | ●          | ● |
|      |        | ラボ           | TEM/電子線回折       | 触媒粒子径、PtCo合金構造 | ●          | ● |
|      |        |              | クライオTEM         | アイソマー複製構造      | ●          | ● |
| ICP  | PtCo組成 |              | ●               | ●              |            |   |
| 電解質膜 | 放射光    | 断面SEM-EDX    | 構造観察、Ce、Pt、Co分布 | ●              | ●          |   |
|      |        | 断面TEM-EDX    | 微小領域観察          | ●              | ●          |   |
|      |        | 断面ラマンマップ     | 膜厚方向のSO/CFIL    | ●              | ●          |   |
|      |        | ICP          | 膜中の金属イオン量       | ●              | ●          |   |
| GDL  | 放射光    | コンパクション散乱    | 凝縮水・Ce分布        | ●              | ●          |   |
|      |        | 断面SEM-EDX    | 構造観察、Ce分布       | ●              | ●          |   |

MIRAIセルの分解調査から得られた結果を  
 プロトコルの耐久条件に反映



### 3. 研究開発成果について

## 評価解析FC-Platform

c) 評価プロトコル/ハードウェア/ 達成度○

**WP3 評価共通化**



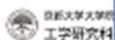
d) 材料インフォマティクスツール/ 達成度△

**WP1 データ駆動型**

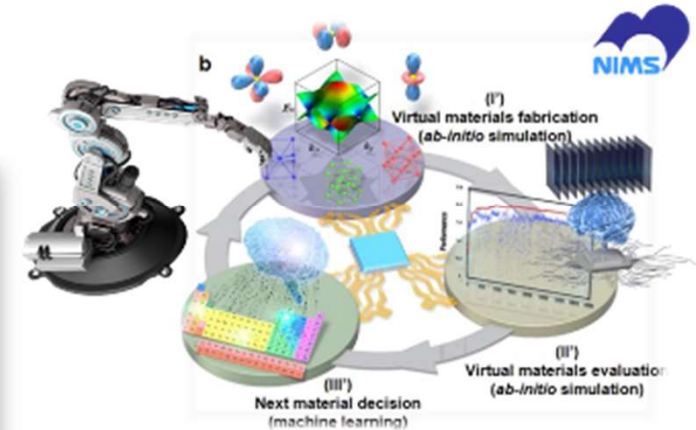
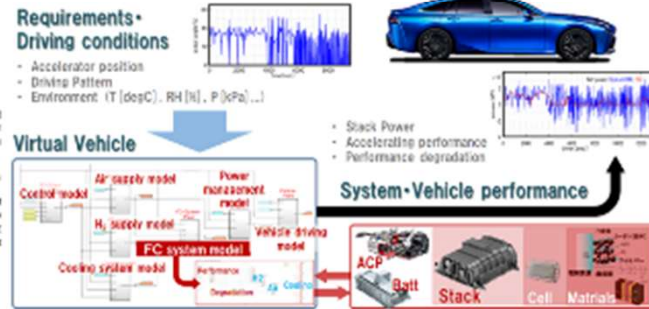


**WP2 モデル駆動型**

e) FCシステムシミュレータ(MBD)/ 達成度○



Model Based Development



Y. Iwasaki *et al.* Commun. Mater. 2, 31 (2021).

**3つのWPにおける成果を公開しアカデミア・産業界で広く活用**



### 3. 研究開発成果について 課題共有：オープンシンポジウム

#### 第11回FC-Cubic オープンシンポジウム@米倉山Nesrad w/山梨大学 水素・燃料電池シンポジウム

**① 産業界・アカデミア課題**

FCV課題共有フォーラム概要  
 日時：2019年11月27日  
 参加者：約300名  
 内容：研究発表、パネル、展示  
 会場：FCV燃料電池の現状と未来  
 (1) 燃料電池、水素供給システム  
 (2) 2030/2040年に向けたシステム構築と社会  
 (3) FCEC (燃料電池車実用化推進協議会)

双方向コミュニケーション

**③ アプリケーション**

用途拡大実現性

**コミュニティ仲間作り**

**② 評価解析P/F進捗**

技術アップデート

高度現象解析 大規模シミュレーション

**④ 他国取組み状況**

政策・ビジネス・R&D



シンポジウムを通じた課題共有を継続延べ11回開催。  
 文科省の水素・燃料電池の大型プロジェクトについての  
 講演も実施。

聞いて話してよかったオープンシンポジウムから  
 現地に行ってきたオープンシンポジウムに  
 アップデートしてまいります

### 3. 研究開発成果について

## 人材交流：ワークショップ



### 第3回FCワークショップ MIX Platform 講習会 FC材料開発へのマテリアルズ・インフォマティクス(MI)導入による開発の加速

MIX Platform  
2022年09月15日

目的 NEDO事業「燃料電池等利用の飛躍的拡大に向けた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(MI)による燃料電池材料の研究開発」で開発中の燃料電池に特化したMI解析ソフト「MIX Platform」に関するワークショップを開催した。  
MIの有効性を実感して頂き、皆さまの今後の材料開発を加速するためのツールとして活用頂く契機とする。

主催 FC-Cubic  
共催 NEDO  
日時 2022年9月14日(水) 13:00~16:30  
会場 東京国際交流館 平成プラザ 3Fメディアホール  
申込 ① オンライン参加 講演 116名  
② 会場参加 講演 26名

参加者：来場26名(限定)、Web116名



NIMS 袖山先生  
エネルギー材料設計G GL



NIMS 富中先生  
ソフト化学グループ主幹研究員



講習会会場@東京国際交流館 メディアホール



### 第3回FCワークショップ プログラム



| 時間          | 内容  | 場所              | 講演機関             | 講演者(敬称略)        |
|-------------|---|-----------------|------------------|-----------------|
| 13:00-13:05 | 開会挨拶  | オンライン<br>& 講習会場 | NEDO PL (トヨタ自動車) | 木崎 幹士           |
| 13:05-13:15 | NEDO 挨拶   |                 | NEDO PM          | 後藤 謙太           |
| 13:15-14:00 | ① MIX Platform 機能について<br>② MIXで出来ること (MI解析、実験解析、DB)         | 講習会場のみ          | NIMS             | 袖山 慶太郎<br>富中 悟史 |
| 14:00-14:10 | 休憩 **以降は、会場参加者のみ  |                 | FC-Cubic         | 雨宮 一樹           |
| 14:10-14:20 | 講習内容の説明 課題準備等   |                 | NIMS             | 袖山 慶太郎          |
| 14:20-16:20 | MIX platform 実習<br>(各自のパソコンから実施。<br>例題データ+オープンになってもよい持参データ) |                 | NIMS             | 袖山 慶太郎          |
| 16:20-16:25 | まとめ   |                 | NIMS             | 袖山 慶太郎          |
| 16:25-16:30 | 閉会挨拶  | FC-Cubic        | 雨宮 一樹            |                 |



### 第4回FCワークショップ FC-DynaMo講習会



京都大学大学院  
工学研究科化学工学専攻

Model Based Development  
Requirements - Driving conditions  
Accelerator position  
Driving Pattern  
Environment (T, DewPt, RH(N), P, DPd...)  
Virtual Vehicle  
Air supply model, Power management model, Vehicle driving model, FC system model, Cooling system model, Performance monitor, Controller  
Stack Power, Accelerating performance, Performance degradation  
System-Vehicle performance  
ACP, Battery, Cell, Matrix

### システムシミュレーター「FC-DynaMo」のセミナー ～材料から最終製品性能を知る～

FC-DynaMo v.1.0 MS Windows インストーラ/パッケージ (SetupFcDynaMo-1.0.10.msi)



京都大学  
長谷川先生

東京農工大学  
命先生

参加者：来場30名(限定)、Web52名(アプリ版のみ)

# 3. 研究開発成果について モノづくり：オールスターFC

|                                 | 5月                              | 6月    | 7月                                 | 8月               | 9月 | 10月                      | 11月 | 12月 | 1月                          | 2月      | 3月         |
|---------------------------------|---------------------------------|-------|------------------------------------|------------------|----|--------------------------|-----|-----|-----------------------------|---------|------------|
| AFC K/O☆                        |                                 | ▽全体会議 | ☆AFC会議                             | ☆                | ☆  |                          |     |     |                             |         |            |
| 課題発信                            | ADCAL/JFCA合同セミナー<br>TRAFAM技術報告会 |       | ▽<br>▽TECHNOFRONTIER<br>(メカトロ系展示会) |                  |    | ▽化学工学会                   |     |     | ▽Meet Up Chubu<br>(中部経済産業局) |         | → ロードマップ策定 |
| 大学の先生<br>へご相談・<br>機関の訪問<br>/MTG |                                 |       |                                    |                  |    | ▽九大・井上先生<br>アカデミアヒアリング6件 |     |     |                             | ▽新規テーマ① | ▽新規テーマ②    |
|                                 |                                 |       |                                    | ▽Fraunhofer ENAS |    | ▽山梨大・内田先生                |     |     |                             |         | ▽産業技術研究所   |

### MEAプロセス：インク製造・塗布・乾燥における課題

| 課題                  | 詳細                                     | 開発内容                    |
|---------------------|--|-------------------------|
| 電池性能/塗膜構造/インク物性の紐づけ | 高機能を発現する理想的な触媒層構造を意図したインク制御            | 塗膜形成の可視化・SIM技術を駆使した現象把握 |
| 乾燥条件による触媒構造制御       | 高機能を発現する理想的な乾燥での触媒層形成の可視化・SIM技術を駆使した制御 |                         |
| インク塗布安定性            | インク物性                                  |                         |
| インク経時安定性            | インク物性                                  |                         |

インク製造・保管  
性能/構造/材料・工法の  
化学工学会 第53回秋季大会

### 表面処理工程の課題1/2

ありたい工程の姿 \*コーティングとプレスはどちらが先でもよい

コーティング材 耐久性：バイポーラ  
金属セパレーター

### エージング さらに知りたいこと

1) Pt触媒表面のクリーニング、付着物除去

各化学結合がどの工程・段階で生成するか？

付着物発生原理・Ptに付着する経路

インク中のアイノマやその分解物がいつどうやってPtと結合するか？

シール材料の有機物はどうなるかとPtに付着するか？

化学種によるエージング時間への影響

分子構造の影響寄与度、メカニズム

Pt表面に検毒物質を付着させない各工程要件の明確化

官能基 結合しやすさ  
分子重、分子鎖長 動きやすさ

組み合わせとしてどう影響するか？

化学工学会 第53回秋季大会

### NEDOテーマ検討

#### 触媒形成プロセスにおける プロセスインフォマティクス適用

現状課題：熟成・すり合わせに依存、作業者に個人化、低再現性

本研究：プロセスパラメータ、実験計画、情報管理、評価データ、中間データ、結果考査

データ駆動型プロセス・インフォマティクスによる触媒形成プロセス研究のハイスタンダード化

#### FC分析・解析技術を駆使した エージングのメカニズム解明

ナノ化（サスペンション）・インク → 塗布・プレス等 → MEA → セル

複合体形成現象解明 → MEA形成現象解明 → エージングセル内部現象

高エネルギーX線回折・全散乱  
触媒インクの中長期構造

X線小角散乱 (SAX)  
塗布層の規則構造の解析  
GI-WAXS, GI-SAXS  
塗布乾燥時の触媒層構造  
高エネルギーX線イメージング法  
塗布乾燥時の触媒層構造、厚さ変化

X線吸収  
高エネルギーX線イメージング法  
コントラスト散乱イメージング  
セル構成材料のイメージング  
触媒層材料のイメージング

課題解決をOEM 4社とともに進め、NEDO事業テーマ登録に向け先生方と議論 & 提案



## 4. 今後の見通しについて

| 研究開発テーマ                         | 今後の計画   |
|---------------------------------|---|
| プラットフォーム構築                      | 4つのプラットフォーム(評価解析・課題共有・人材育成・モノづくり)を構築し、NEDO事業者の研究開発に貢献                             |
| 材料研究マネジメント<br>電気化学評価マネジメント      | NEDO事業者からの評価解析ニーズを適切にくみ取り、電気化学G・材料解析Gへの評価解析をマネージし、フィードバックの                        |
| スタックシミュレーターとMIの<br>マネジメント       | スタックシミュレーター(FC-DynaMo)、マテリアルインフォマティクス(MIX-Platform)の構築を推進し、NEDO事業者をはじめ広く一般への普及を促進 |
| 技術ロードマップの調査・整理                  | ロードマップのブラッシュアップと2035年目標の提案  |
| 技術のオープンコミュニティー化<br>と<br>研究土壌の醸成 | 計11回のオープンシンポジウムを継続し、産官学のオープンコミュニティーの拡大を図る   |