

NEDO 燃料電池・水素技術開発ロードマップ

－FCV・HDV 用燃料電池ロードマップ（解説書）－

2023 年 2 月

はじめに

国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（以下「NEDO」）では、1980年の創立以来、水素・燃料電池に関する技術開発に取り組んできました。基盤技術開発から各種実証研究、基準・規格作りなどの総合的な取り組みの成果もあり、我が国は2009年に家庭用燃料電池「エネファーム」を、2014年に燃料電池自動車を先駆けて市場に導入するなど、水素・燃料電池分野で世界をリードしてきました。

昨今世界各国でカーボンニュートラルの実現に向けた動きが加速する中、水素・燃料電池に対する期待が急速に高まっています。同時に、本分野の技術開発や事業展開が加速度的に進展し、競争が激しさを増しています。このような状況下、我が国が引き続き本分野をけん引し、カーボンニュートラルの実現に貢献していくためには、中長期的なビジョンを関係者間で共有し、戦略的かつ効率的に取り組むを進めていくことが必要不可欠です。

NEDOは2005年から、産学官が長期的視野を共有して技術開発に取り組むために、燃料電池・水素技術開発ロードマップを公開してきました。今回の改訂において、FCV・HDV用燃料電池ロードマップに関しては、2030年頃および2040年頃に達成すべき大型・商用モビリティ（HDV）用燃料電池の目標を新たに設定し、この目標を達成するために取り組むべき技術開発課題をとりまとめました。（2021年度に2030年目標、2022年度に2040年目標を策定）

本ロードマップで示す目標は海外と比べても野心的なものとなっています。特に新たに設定した2040年頃の目標は極めて挑戦的であり、この達成のためには非連続な革新的イノベーションが必要です。これまで以上に長期的な視点に基づく産学官一体となった取り組みが求められるとともに、材料化学や機械工学、情報科学などの多様な分野からの新規参入、若手の人材育成が重要となります。本ロードマップが今後の取り組みに向けた議論の基礎となり、また異分野、異業種、若手の技術者・研究者が関心を持つきっかけとなることを願っております。

最後に、本ロードマップの作成にあたり、企業や研究機関、大学など、非常に多くの機関の方々のご協力を賜りました。この場をお借りして、厚くお礼を申し上げます。

国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（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

目次

1. FCV・HDV用燃料電池ロードマップの概要	1
1.1 ロードマップ策定の背景	1
1.2 製品目標	3
1.3 FCシステム目標	4
1.4 FC材料目標	6
1.5 FC生産技術目標	8
1.6 水素貯蔵目標	9
1.7 DX・基盤技術	9
2. 目標の考え方と達成のための技術課題	10
2.1 各アプリケーションの現状の課題と目標	10
各アプリケーションの現状の課題と目標	10
2.1.1 各アプリケーションを取り巻く環境	10
2.1.2 使用環境	11
2.1.3 最大出力	12
2.1.4 耐久時間	12
2.1.5 FCシステム搭載性	12
2.1.6 貯蔵システム搭載性	13
2.1.7 航続距離または連続運転時間	14
2.1.8 その他補足	14
2.2 要求I-V特性の検討	18
2.2.1 2030年頃の目標設定の進め方	18
2.2.2 大型トラック	18
2.2.3 他のアプリケーションのシステム成立の検討	24
2.2.4 2040年目標	30
2.3 FCシステムとしての技術目標	37
2.3.1 コスト	37
2.3.2 FC体積出力密度	39
2.3.3 Pt量（資源循環と将来目標@2050年）	41
2.3.4 CN対応に向けた水素FC以外の取り組み状況	43
2.4 水素貯蔵システムとしての技術目標	45
2.4.1 高圧水素貯蔵	45
2.4.2 液体水素貯蔵	48
2.4.3 水素貯蔵材料	49
2.5 FC材料目標（従来技術の延長による2030年頃までの達成シナリオ）	53
2.5.1 材料目標の考え方	53
2.5.2 要求I-V特性を満たすための材料初期物性の検討	53

2.5.3	主要材料の物性目標	60
2.5.4	現状の課題と目標達成に向けた開発の方向性	62
2.5.5	主要材料コストの目安	66
2.5.6	材料評価の考え方	69
2.6	FC材料目標（技術革新による2040年頃までの達成シナリオ）	73
2.6.1	40年目標達成に向けた考え方	73
2.6.2	要求I-V特性を満たすための材料初期物性の検討	74
2.6.3	主要材料の物性目標	80
2.6.4	目標達成に向けた材料開発の方向性	81
2.6.5	評価・解析技術	92
2.6.6	人材育成	109
2.7	FC生産技術	112
2.7.1	生産能力の推移予測とライン原単位の考え方	112
2.7.2	生産速度の目標とタクトタイムの考え方	113
2.7.3	スタックコスト目標 材料コストと加工費	114
2.7.4	生産技術課題	116
2.8	水素貯蔵技術	120
2.8.1	技術開発課題（高圧水素）	120
2.8.2	技術開発課題（液体水素）	123
2.8.3	技術開発課題（水素貯蔵材料）	123
2.9	DX技術	125
2.9.1	データベースおよびデータプラットフォーム	125
2.9.2	インフォマティクス	126
2.9.3	自動・自律実験	131
2.9.4	計算技術・モデル化技術	131
2.9.5	自然言語処理（NLP）	133

1. FCV・HDV用燃料電池ロードマップの概要

1.1 ロードマップ策定の背景

近年の世界におけるカーボンニュートラル（CN）実現に向けた水素関連施策の強力な推進には目を見張るものがある。2020年にはEUが7月に水素戦略を公表、ドイツ、フランス等の欧州主要国においても独自の国家水素戦略を策定し、11月には米国が水素プログラム計画を発表するなど、世界中で水素関連の技術開発および社会実装に向けた取組が進められようとしている。

さて、これら水素の利活用の最重要デバイスであり、高いエネルギー効率を有しつつ低炭素化に貢献できる燃料電池（Fuel Cell、以下FCと称す）システムに対しては、世界的な地球温暖化問題の解決に向けたキーテクノロジーとして更なる普及拡大が期待されている。このため、水素・燃料電池戦略協議会において策定された「水素・燃料電池戦略ロードマップ（2014年6月策定、2016年3月改訂、2019年改訂）」では、FCの普及拡大に向けた政府の骨太の方針や政策目標が示されるとともに、今後の市場規模の拡大を予想している。エネルギー・地球環境問題の解決、産業技術力の強化をミッションとするNEDOとしては、これら政府目標等を具現化するために取り組むべき技術的課題を明確化するとともに時系列に整理した「NEDO燃料電池・水素技術開発ロードマップ」（以後、「ロードマップ」という。）を2005年に策定し、過去に4度、最新の政策、市場及び技術動向等を反映させるために改訂してきた。前回の改定は2017年であったが、その後は世界的なSDGsの広がり、主要各国のCN宣言をはじめとした社会環境の変化が急速に進んでいる。そのなかで、運輸部門のCO₂排出量削減に向けて移動体の変革がその重要な役割の一つを担っており、2017年ロードマップに明示した乗用車（FCV）に加え、変革すべき移動体のカテゴリーが急速に広範囲化している。特にFCの移動体への活用は、世界各国で大型・商用モビリティ（HDV：Heavy Duty Vehicle）への拡大が顕著で、その代表的なカテゴリーがトラックへの適用であり、加えて電車・船舶への拡大も進んでいる。また、産業界も電動化への動きが活発化しており、従来のフォークリフトに加えて、建機、農機への拡大が見込まれている。これらの移動体の電動化の検討が進むにつれ、バッテリーからの電力供給では、通常稼働に十分なエネルギー供給が困難なケースが多く実在し、これをカバーするためにカーボンニュートラル燃料の有力候補としての水素活用からFCへの適用が検討されている。

このような背景のもと、FCのHDVへの適用において重要となる広作動温度への対応や耐久性向上に対し、産業界や大学・研究機関と議論を重ね、2030年頃の普及時に要求されるHDVの各アプリケーションの製品目標とそれらの製品要求を満足する共通仕様となるスタック性能を検討した上で、スタックを構成する材料目標と開発の方向性へブレークダウンし、新たにHDV用燃料電池ロードマップを2022年3月に策定した。今年度は、2021年度に着手できなかったHDV用燃料電池の2040年頃の目標や2030年頃および2040年頃に達成すべき水素貯蔵システムの目標を検討するとともに、2040年頃のFCの目標達成に向けた材料開発のシナリオ検討、FCVおよびHDVの2030年頃の本格普及開始時期を前提としたFCの生産技術目標を策定した。さらに、水素・FCの開発力の強化（開発期間の短縮）に結びつけていくためのデジタル・トランスフォーメーション（DX）技術の在り方を整理した。

本解説書は、ロードマップにおける製品目標に対する考え方、FCシステムおよび水素貯蔵システムの目標、FCシステムの目標値の検討に活用したシミュレーションモデル等の前提条件と計

算結果、FC の材料目標と開発の方向性および材料特性の評価方法の方針、FC の生産技術、水素貯蔵技術（高圧水素・液体水素・貯蔵材料）と開発課題についてまとめたものである。

特に、2040 年頃の FC システム目標は、システムの進化に加え、現行の延長線上の改良だけで到達困難な材料のブレークスルーが要求されるが、達成できれば水素エンジンに対して燃費が優れ、バッテリーと比較して質量密度が高く、積載可能な重量が大きくなるなど、FC の優位性を確保することができる。こうしたチャレンジングな目標の達成に向けて、材料のポテンシャルの科学的な理解を軸に分類して、学理で成り立つ可能性のシナリオを検討し、将来の研究ニーズとして方向性を示すとともに、現状技術の限界を打破するための基礎研究（新学理・革新コンセプトの創出）、高度な解析、計算科学技術による機構・現象解明や DX 技術の活用による材料・プロセス探索の加速、これらの研究推進に必須となる人材育成の在り方も検討した。

なお、FCV の 2040 年頃の目標値、水素貯蔵システムのうち、連続的に長距離、又は長時間運用する用途への解決策候補の一つとして期待される液体水素貯蔵システムの目標と技術開発課題等は十分な調査・議論ができなかったため、今年度に提示した 2040 年頃の目標達成のシナリオの仮説・検証を含めて継続検討していく方針である。

1.2 製品目標

ここでは、前記カテゴリーに対応すべく、各製品の一般的な使用環境における要求仕様に基づき、これらを包含した目標を示す。ただし、世界全体を見渡した場合、製品によっては、そのカテゴリー独特の使用環境条件等の場合があるため、一部は検討を継続し今後追加する。

従来の乗用車（今回変更なし）に加えて、2030年頃にFCシステム活用が想定される移動体のカテゴリーとターゲットとすべきアプリケーションを示す。今回の移動体としてのカテゴリーは、トラック、鉄道、産業、建機、農機および船舶を包含した目標とすべく、以下に示すアプリケーションの仕様を想定して実施した。

- トラック：25トン以下（市場規模と運行エリアから最も水素消費量が大きく期待される）
 - 船舶：内航貨物船、沿岸旅客船（長時間稼働を必要とする）
 - 鉄道：現有ディーゼル車両の代替え（電化が厳しい路線など）。将来的には一部電車にも適用視野
 - 建機：現有ディーゼル機で搭載燃料が多い中大型車両
 - 工業（産業）：フォークリフト（長時間稼働を必要とする車両）
 - 農機：比較的大きな農地で連続的かつ長時間稼働を必要とする車両
- （＊）船舶における外航船や航空機については、水素ベースの燃料（合成燃料など）もしくはバイオフェューエル等への適正も考慮して今回は対象から除外した。

2030年頃までは出力、耐久性の観点から25トンクラス大型トラックの要求値を達成できれば上記に記載のその他のアプリケーションの要求値も包含できたが、44トンクラスの要求値まではカバーできなかった。そこで、2040年頃に向けては大型トラック市場のほとんどをカバーできる44トンクラスの大型トラックまで含めた目標値の検討を追加した。

今回は、前記アプリケーションの一般的な使い方をFCシステムの動かし方に落とし込み、これをFCシステムへの要求として定義した。これにより、それぞれのアプリケーションの一般的な使い方に対応したFCシステムの目標値として設定した。

表 1.2-1 要求仕様の定義

要求仕様の項目	定義
システム最大/定格出力 [kW]	FCと2次電池合計の最大または定格出力
FCシステム定格出力 [kW]	FCシステムの定格出力(Net出力)
使用外気温 [°C]	製品を使用する外気温
耐久時間 [万 hr]	製品に要求される耐久時間
冷却性能 [kW/°C]	冷却能力＝ラジエータの冷却能力/(冷却水温度－外気温) ここでは冷却水温度は105°C、外気温は45°Cとした
高度 [千 m]	製品を使用する最大高度
FCシステム許容搭載スペース [L]	製品に搭載可能なFCシステム許容スペース
FCシステム許容搭載重量 [kg]	製品に搭載可能なFCシステム許容重量
水素貯蔵許容搭載スペース [L]	製品に搭載可能な水素貯蔵許容スペース
水素貯蔵許容搭載重量 [kg]	製品に搭載可能な水素貯蔵許容重量

表 1.2-2 各アプリケーションの 2030 年頃の主な要求仕様一覧
(44 トンクラス大型トラックのみ 2040 年頃の要求仕様)

アプリケーション	システム 最大/定格 出力[kW]	FCシステム 定格出力 [kW]	使用 外気温 [°C]	耐久時間 [万 hr]	冷却 性能 [kW/°C]	最高使用 高度 [千 m]	FCシステム 許容搭載 スペース [L]	FCシステム 許容搭載 重量 [kg]	水素貯蔵 許容搭載 スペース[L]	水素貯蔵 許容搭載 重量[kg]
25 トンクラス 大型トラック	300	200	-30~50	5	3.5	3 5(性能減を許容)	502	230	2,500※1	400
44 トンクラス 大型トラック	450	350	-30~50	5	3.5	3 5(性能減を許容)	502	460	2,500※1	400
内航貨物船	600	600	-25~50	6	100	0.02	18,000	11,000	72,000	※2
沿岸旅客船	480	480	-25~50	3	100	0.02	7,000	4,000	24,000	3,000
鉄道 2 両編成	800	400	-30~45	5	6	1.3	1,300	1,000	5,086	2,000
油圧ショベル 20 トンクラス	120	120	-30~50	1	1.27	5(出力を制限)	1,300	1,000	1,463	400
油圧ショベル 13 トンクラス	70	70	-30~50	1	1.0	5(出力を制限)	400	500	1,280	400
フォークリフト 1-2 トンクラス	30	8	-20~40	2	1.0	0.5	339	500	84	80
農業用 トラクタ	50kW~	50kW~	-30~45	1	1.14	2 50kW クラスを想定	125	250	500	120

※1 全長規制の緩和によるホイールベースの延長を前提に搭載スペースを確保した場合

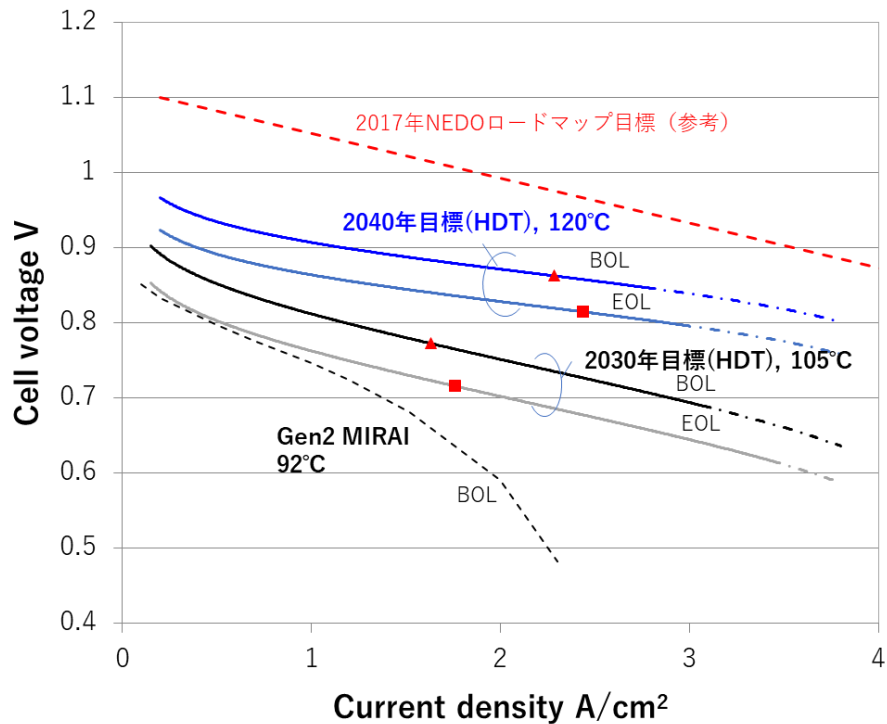
※2 内航貨物船は質量許容度があるため

1.3 FC システム目標

前記の各アプリケーションの一般的な使い方から落とし込んだ要求仕様、さらに各アプリケーションの一般的な動作パターンを想定して、策定した 2030 年頃、2040 年頃の性能目標 (I-V 特性、耐久時間、コスト、Pt 使用量、体積出力密度) を示す。この目標値は各アプリケーションの目標性能を包含したものである。

(1) 要求 I-V 特性 (BOL/EOL)

各アプリケーションでの FC システム仕様を想定し、かつその耐久要件を含めた製品要件から求めた I-V 特性を図 1.3-1 に示す。今回、2030 年頃の I-V 特性目標値に加え、新たに 2040 年頃の目標値を示した。2030 年頃の目標値はその想定年代の各アプリケーションの中で最も厳しいと想定される 25 トンクラス大型トラックの製品要件から導出した。2040 年頃は、44 トンクラスまでの全てのクラスに対して、既存のエンジンを、搭載条件を含めて FC システムで置き換え可能とすること (ディーゼルパリティ) を要件として導出した。なお、図中の I-V 特性上の■は特性導出の基となった熱定格動作点を、▲は BOL での熱定格相当出力の動作点を示す。また、一点鎖線は今回のアプリケーション毎のシミュレーションで使われなかった領域を表しているが、乗用車を含めたアプリケーションや制御設計によって異なることを付記しておく。I-V 特性の導出方法については 2.2 節で述べる。



※1 BOL(Beginning of Life: 初期性能)、EOL(End of Life: 耐久後性能)、耐久パターン:WHVC+始動停止(1回/cycle)

※2 2030年頃目標 I-V 特性(Pt量 0.19g/kW 前提): ▲:電流密度 1.63A/cm², 電圧 0.77V, ■:電流密度 1.76A/cm², 電圧 0.72V

※3 2040 年頃目標 I-V 特性(Pt量 0.07g/kW 前提): ▲:電流密度 2.29A/cm², 電圧 0.86V, ■:電流密度 2.44A/cm², 電圧 0.81V

※4 温度はスタックの冷却水出口温度

図 1.3-1 大型トラックの製品要件から導出された 2030 年頃、2040 年頃の目標 I-V 特性

(2) その他 FC システム/スタックとしての技術目標

I-V 特性以外の FC システム/スタックとして重要となる目標一覧を表 1.3-1 に示す。ブランクの部分に関しては検討を継続し今後追加する。

表 1.3-1 2030 年頃、2040 年頃の FC システム/スタック目標値

項目	2030 年頃の 目標値	2040 年頃の 目標値	備考
耐久時間 [h]	50,000	50,000	※2.2.2 項参照
FCシステムコスト[万円/kW]	0.9		※2.3.1 項参照
FCスタックコスト[万円/kW]	0.45		※2.3.1 項参照
Pt 目付量 [mg/cm ²]	0.24	0.14	※2.3.3 項、2.5.1 項参照 Pt 使用量は大型トラックの熱定格参照
うちカソード触媒層の Pt 目付量[mg/cm ²]	0.20	0.12	
アノード触媒層の Pt 目付量[mg/cm ²]	0.04	0.02	
Pt 使用量 [g/kW]	0.19	0.07	
FCシステム体積出力密度 [kW/L] ※最大出力ベース	0.6	0.8	※2.3.2 項大型トラック参照
FCスタック体積出力密度 [kW/L] ※定格出力ベース	6.76	10.38	※2.3.2 項参照

1.4 FC 材料目標

図 1.3-1 で示した 2030 年頃の初期の目標 I-V 特性（黒線、冷却水出口温度 105℃）を満たすための物性パラメータを根拠に、2030 年頃の主要材料の物性目標の項目と目標値を表 1.4-1 のように定めた。さらに、図 1.3-1 で示した 2040 年の初期の目標 I-V 特性（青線、冷却水出口温度 120℃）を満たすための物性パラメータを根拠に、2040 年頃の主要材料の物性目標の項目と目標値を表 1.4-2 のように定めた。なお、電解質膜面の最高温度は冷却水出口温度に対して+5~10℃となるが、通常走行における大半の運転条件は 70℃程度であり、材料も広範な作動条件に対応することが前提である。また、参考のため、その各項目の現行材料からなる膜電極複合体（MEA）での物性、特性値の実測値も併せ示した。

表 1.4-1 2030 年頃の主要材料の物性目標 ★は、今後測定

要素	項目		2030 年頃の目標値		実測値			
			物性値	仕様・特性値	Gen2 MIRAI ※8	一般材料		
空気極触媒 (層)	PGM 目付量(mg/cm ²)			0.20	0.17	0.20	田中貴金属 Pt/C TEC10V30E ※9	
	ECSA (m ² /g)		60		48	61		
	質量活性 (A/g) @0.9V	at100℃、100%RH	1810		★	★		
		at80℃、100%RH	1740		500	95		
	触媒層厚さ(μm)			6.0	9.1	7.4		
触媒層ガス拡散抵抗 (s/m)		at 80℃, 80%RH	10		9.1	18.1		
電解質	膜	膜厚 (μm)			8.0	8.5	25	Chemours Nafion™ NR211 ※9
		H ⁺ 伝導率 (S/cm) ※1	at 120℃, 30%RH	0.032		0.018	0.016	
			at 100℃, 40%RH	0.041		0.027	0.024	
			at 80℃, 80%RH	0.12		0.106	0.086	
		水素透過性 ※3		今後設定		★	★	
	酸素透過性 ※4		今後設定		★	★		
	機械強度 ※5		(暫定) 引張最大強度(MPa) at 23℃, 50%RH	今後設定		50	30	
			(暫定) 引張破断伸び(%) at 23℃, 50%RH	今後設定		★	250	
	アイオノマ	H ⁺ 伝導率 (S/cm)	at 120℃, 30%RH	0.032		—	★	Chemours Nafion™ D2020 触媒層抵抗 ※9
			at 100℃, 40%RH	0.041		—	★	
at 80℃, 80%RH			0.12		—	★		
空気極触媒層抵抗(Ωcm ²)		at 120℃, 30%RH		0.13	0.77	0.37		
	at 100℃, 40%RH		0.10	0.41	0.24			
	at 80℃, 80%RH		0.035	0.10	0.060			
GDL・流路・セパレータ	GDL 面積抵抗 (Ωcm ²)			0.0010	★	<0.01	SGL CARBON Sigracet® 22BB ※10 分子拡散抵抗※9	
	流路・GDL(分子拡散抵抗) (s/m) ※6		at 80℃, 80%RH	18	58.3 (並行流路)	60.8 (並行流路)		
	GDL/セパ、セパ/セパ等:接触抵抗合計 (Ωcm ²)			0.0065	★	—		
	GDL 機械強度物性 ※7	(暫定)圧縮弾性率	今後設定		★			
(暫定)曲げ剛性 (N/mm)		今後設定		★	0.9 ~1.5			

※1：電解質膜の H⁺伝導率は、補強材込みの伝導率。クエンチャ添加など、耐久性を担保した状態での伝導率。

※2：低温起動性に影響する因子。スタックとしての要求仕様を集約したうえで設定。

※3、※4：耐久性、燃費に影響する因子。今後、設定。

※5：セルの構造・仕様により必要な物性値が異なると考えられることから、当面、指標となる物性項目は仮置き。目標値とともに今後の議論とする。ここでは、現行材料の物性を参考値として示す。

※6：GDLと流路の構造との組み合わせで決まる特性値。

※7：セルの構造・仕様により必要な物性値が異なると考えられることから、当面、指標となる物性項目は仮置き。目標値とともに今後の議論とする。ここでは、現行材料の物性を参考値として示す。

※8：第二世代 MIRAI の MEA を用いた実測値、解析結果。(FC-Cubic 測定)

※9：触媒：田中貴金属 TEC10V30E、カソード触媒担持量：0.2mg-Pt/cm²、アノード触媒担持量：0.1mg-Pt/cm²、アイオノマ：Chemours Nafion™ D2020、I/C:1.0、電解質膜：Chemours Nafion™ NR211、GDL：SGL-CARBON SIGRACET® 22BB からなる MEA で測定した値。(FC-Cubic 測定)

※10：メーカー公表値 <https://www.sglcarbon.com/en/markets-solutions/material/sigracet-fuel-cell-components/>

表 1.4-2 2040 年頃の主要材料の物性目標 ★は、今後測定

要素	物性	2040 年頃の目標値	2030 年頃の目標値	Gen2-MIRAI※3	一般材料	
空気極触媒層	Pt 目付量 (mg cm ⁻²)	0.12	0.20	0.17	0.20	田中貴金属 Pt/C TEC10V30 E※4
	ECSA (m ² g ⁻¹)	200	60	48	61	
	質量活性@120°C, 100%RH, O ₂ 分圧 100 kPa _{abs} , 0.9 V (A g ⁻¹)	42,500	—	—	—	
	質量活性@80°C, 100%RH, O ₂ 分圧 100 kPa _{abs} , 0.9 V (A g ⁻¹)	39,000	1740	500	95	
	触媒層ガス拡散抵抗 (s m ⁻¹)	8	10@80°C, 80%RH	9.1@80°C, 80%RH	18.1@80°C, 80%RH	
	触媒層厚さ (μm)	3.6	6.0	9.1	7.4	
	アイオノマ H ⁺ 伝導率@120°C (S cm ⁻¹) ※1	0.15@12% RH	—	—	★	Chemours Nafion™ D2020 触媒層抵抗 ※4
電解質膜	膜厚 (μm)	1	8.0	8.5	25	Chemours Nafion™ NR211※4
	H ⁺ 伝導率@120°C (S cm ⁻¹) ※1	0.15 @12%RH	0.032 @30%RH	0.018 @30%RH	0.016 @30%RH	
GDL・流路・セパレータ	GDL 面積抵抗(Ωcm ²)	0.0010	0.0010	★	<0.01	SGL CARBON SIGRACE T® 22BB ※5 分子拡散抵抗※4
	流路・GDL(分子拡散抵抗) (s/m) ※2	18	18@80°C, 80%RH	58.3@80°C, 80%RH (並行流路)	60.8@80°C, 80%RH (並行流路)	
	GDL/セパ、セパ/セパ等：接触抵抗合計 (Ωcm ²)	0.0004	0.0065	★	—	

※1：電解質膜の H⁺伝導率は、補強材込みの伝導率。クエンチャ添加など、耐久性を担保した状態での伝導率。表では 2030 年目標との対比から、120°Cでの伝導率を示しているが、55~125°Cの範囲（湿度 12%RH 以上）で、この目標を満たすものとする。上限温度に関しては、動力性能要件において、電解質の温度が冷却水出口温度 120°Cよりも 3°C上がるとの図 2.6.2-3 に示すシミュレーション結果を加味し、シミュレーションの誤差を考慮して 2°Cのマージンを考慮して 125°Cと設定したものであり、下限温度に関しては、先述の通常走行時（冷却水出口温度 70°C付近、図 2.2.3-4 参照）での燃費確保を念頭に、この条件での空気極入口温度を 55°Cと想定し、設定したものである。なおさらなる低温領域でのプロトン伝導率に関しては、今後の検討課題と考える。湿度に関しては、図 2.6.2-3 の湿度分布から、湿度が空気極入口の 12 %を下回らないことに基づき設定した。

※2：GDLと流路の構造との組み合わせで決まる特性値。

※3 第二世代 MIRAI の MEA を用いた実測値、解析結果。(FC-Cubic 測定)

※4 触媒：田中貴金属 TEC10V30E、カソード触媒担持量：0.2mg-Pt/cm²、アノード触媒担持量：0.1mg-Pt/cm²、アイオノマ：Chemours Nafion™ D2020、I/C:1.0、電解質膜：Chemours Nafion™ NR211、GDL：SGL-CARBON SIGRACET® 22BB からなる MEA で測定した値。(FC-Cubic 測定)

※5 メーカー公表値 <https://www.sglcarbon.com/en/markets-solutions/material/sigracet-fuel-cell-components/>

1.5 FC 生産技術目標

今回、FC 生産技術上の目標を表 1.5-1 にまとめた。FCV の普及目標 80 万台@2030 年の達成前提に、2030 年までの国内生産量規模を現状数万台/年から段階的 20 万台/年まで生産規模を増やすシナリオを置いた。タクトタイム (TT) の目安は、枚葉工程 0.5 秒/セル、連続工程 15m/分とおいた。年産 7 万台規模の製造工場で 2 直体制の前提の計算値に近い値である。ドイツ、フランス、韓国、米国の FC 開発動向からも、年産 20 万台、タクトタイム 0.5 秒に計画している国が多い。

経済産業省 (METI) の水素・燃料電池戦略ロードマップの目標および DOE 試算を前提に FC システムコストおよび FC スタックコストの目標値を下表のように定めた。現状レベルから材料費、加工費ともに 70%程度のコスト低減が必要である。また、CN の観点から、FC 生産工場のグリーンファクトリー化の目標を置いた。

表 1.5-1 FC 生産技術目標

	現在	2025 年頃	2030 年頃	2040 年	2050 年頃
普及シナリオ (FC HDV)	国内 数百台	【FCHDV の初期導入段階】		【FCHDV 本格普及段階】 グローバル数 10 万台、国内数万台	
HDV コスト目標			FC システム FC スタック	0.9 万円/kW ※1 0.45 万円/kW	【CN 実現時期】 グローバル 1500 万台※2
普及シナリオ (FCV)	国内 7,500 台	【初期導入段階】【FCV 本格普及段階】 国内 20 万台 ※3		【FCV CN 達成時期】 国内 80 万台 ※3	
FCV コスト目標			FC システム FC スタック	0.4 万円/kW)※1 0.2 万円/kW	国内 300-600 万台 ※4
製造能力目標 HDV+FCV※	3 万台/年 (公表値)		7 万台/年	21 万台/年	→ 50 万台/年
ライン原単位 (想定規模)	2,500 台/月	→ 6000 台/月 ×1 か所		6000 台/月 ×3 か所程度	1 万台/月 ×複数か所
生産速度 (タクトタイム)	枚葉工程 1 秒/セル※6 連続工程 6m/分※7			0.5 秒/セル※6 15m/分※7	0.3 秒/セル※6 20m/分※7
加工費低減目標 材料費低減目標	100% 100%			▲70%※5 ▲70%	
工場の消費エネルギー グリーン化	50%程度			80%	100%達成

※1 NEDO 燃料電池技術開発ロードマップ—HDV 用燃料電池ロードマップ (解説書)

※2 Hydrogen Council 「Hydrogen Scaling up」等に基づいた推計値

※3 METI 水素・燃料電池戦略ロードマップ

※4 FCCJ (燃料電池実用化推進協議会) が 2015 年公表の IEA 「Technology Roadmap Hydrogen and Fuel Cells」を参考に策定した目標台数 (2050 年の目標である温室効果ガス排出量 80%削減に貢献すべく設定した数値、大幅な技術進展を期待したシナリオでは 600 万台)

※5 DOE Mass Production Cost Estimation of Direct H2 PEM Fuel Cell Systems for Transportation Applications:2018 Update 2025 年

現在コストと 2030 年コスト予測値の比率、材料費と加工費とも同率で 70%低減する前提

※6 スタック仕様 125kW、300 セル、電極面積 250cm²、20 日稼働、2 直生産

※7 試算の仮定 電極面積 250cm² 幅 320×130mm で*3 稼働条件で製造した場合

1.6 水素貯蔵目標

2017年公開のNEDO燃料電池・水素技術開発ロードマップでは、貯蔵方式によって区別されていなかった水素貯蔵目標を、貯蔵方式毎に貯蔵密度で表すこととし、表1.6-1に示す。

表 1.6-1 水素貯蔵目標

貯蔵方式	2030年頃の目標		2040年頃の目標		2050年頃の目標	
	質量貯蔵密度	体積貯蔵密度	質量貯蔵密度	体積貯蔵密度	質量貯蔵密度	体積貯蔵密度
	wt%	g/L	wt%	g/L	wt%	g/L
高圧水素貯蔵 ※4	10	28	15 以上※1	29 以上※1	—	—
液体水素貯蔵	17 ※2	検討中	検討中	検討中	—	—
水素貯蔵材料	—	—	—	—	8 以上 ※3	70 以上 ※3

質量貯蔵密度＝搭載水素質量 (kg) / 貯蔵容器質量 (kg) × 100

体積貯蔵密度＝搭載水素量 (g) / 貯蔵容器体積 (L)

※1 超高強度のFRP用繊維、IoT、DX技術を活用した検査技術とそれによる貯蔵容器の安全率等規制緩和などもあわせて目指す想定

※2 数値検討中につき2017年公開の数値を記載

※3 貯蔵圧力は1MPa以下を目指す

※4 目標の前提はL/D≒5の容器とする

上記の目標は海外の目標と比較しても十分に競争力があり、且つチャレンジングな目標である。

1.7 DX・基盤技術

日本の水素・燃料電池の技術開発が、SDGs・CNにおいて日進月歩の領域で世界をリードし、世界的な普及と自国の産業に貢献するためには、市場・技術進化に対応した適切な目標を設定し、その達成に向けた開発力の向上が重要である。

直近の技術開発を加速するためには、早期にDXの活用を推進し、開発力の強化（開発期間の短縮）に結びつけていくことが必要である。他の技術領域を対象としたDXの国の取組みと上手く連携しつつ、水素・燃料電池で個別に取り扱うDXの要素技術としては、基盤としてのデータベースとデータプラットフォーム、インフォマティクス（MI、PI、MEI）、自動・自律実験、計算技術・モデル化技術、自然言語処理を取り上げ、ロードマップに記載した。

また、図1.3-1に示した燃料電池の性能目標や表1.6-1に示した水素貯蔵目標のとおり、現状技術の限界を打破するための基礎研究（新学理・革新コンセプトの創出）が重要となる。高度な解析、計算科学技術による現象・機構解明にもとづき材料やプロセス設計の指針を提示するとともに、これらの解析・計算データを蓄積し、DX技術を活用することで、従来型の試行錯誤による開発手法を打破し、科学的かつ効率的に材料・プロセスの探索を行うことができる。

2. 目標の考え方と達成のための技術課題

2.1 各アプリケーションの現状の課題と目標

各アプリケーションの現状の課題と目標

2030年頃、2040年頃に拡大が想定できるカテゴリーおよびその中心となることが想定される各アプリケーションの一般的な使い方を包含する目標を示したが、アプリケーション毎に考慮もしくは確認しておくべき状況や課題を示す。ここでは、大型トラック、船舶、鉄道、建機、フォークリフト、農機の6つのアプリケーションに関して整理した。特に、代表的な製品としてトラックからは25トンクラスと44トンクラス、船舶からは内航貨物船と沿岸旅客船、鉄道からは2両編成、建設機械では油圧ショベルの20トンクラスと13トンクラス、フォークリフトからは1-2トンクラス、農業用機械からは農業用トラクタ50kWクラスを選定した。

2.1.1 各アプリケーションを取り巻く環境

(1) 2030年頃の市場規模

各アプリケーションの代表的な製品の現状の（既存パワートレインと2030年にFC製品として導入が予測される）市場規模（海外含む）について表2.1.1-1にまとめた。欧州ではHydrogen EuropeのStrategic Research and Innovation Agendaでは2030年頃までに累計9.5万台のFCトラックの普及、非電化区間における新規車両導入の20%をFC列車へ転換する[1]などの目標があり、米国ではCA州内でFCトラック導入7万台（2035年頃）[2]、FCフォークリフトの累計販売台数30万台（2030年頃）[3]などの目標がある。また、民間の市場レポート[4]においても2030年頃のFCトラック市場として累計10万台以上との試算も存在する。

一方、こうした世界的な市場規模はデータのソースにより差があり、また、地域によりクラス別の区分けが異なるため、ここでの値は市場調査の結果等に基づいた予測を含む参考値とする。なお、2040年以降の市場規模については検討を継続し今後追加する。

表 2.1.1-1 2030年頃の市場規模(参考値)

アプリケーション	現状 [台/年] ※既存のパワートレイン	30年予想 [台/年] ※FC導入予想
25トンクラス大型トラック	1,300,000	数万台
44トンクラス大型トラック	240,000	数千台
内航貨物船	数万台	数百台
沿岸旅客船	数千台	数百台
鉄道 2両編成	250	50
油圧ショベル 20トンクラス	200,000	200~20,000
油圧ショベル 13トンクラス	100,000	100~10,000
フォークリフト 1-2トンクラス	380,000	5,000
農業用トラクタ 50kW~	数万台	—

(参考文献)

- [1] Hydrogen Europe and Hydrogen Europe Research, “Strategic Research and Innovation Agenda”, Oct. 2020
[2] California Fuel Cell Partnership, “Fuel Cell Electric Trucks A Vision for Freight Movement in California and Beyond”, Jul. 2021

[3] Fuel Cell & Hydrogen Energy Association, “Road Map to A US Hydrogen Economy”

[4] Global Market for Hydrogen Fuel Cell Commercial Trucks, 2021

(2) 各アプリケーションに対して海外を含む 2030 年頃に適用が予測される規制

2030 年頃に各アプリケーションに対して海外を含めて施行されるゼロエミッションに関する規制について以下の表 2.1.1-2 のとおりにまとめた。

表 2.1.1-2 各アプリケーションに対する 2030 年頃に適用が予測される規制

アプリケーション	主な規制(予測含む)
大型トラック	日本:8トン以上の大型の車について 2020 年代に5千台(累計)の電動車両の先行導入を目指すとともに、水素や合成燃料等の価格低減に向けた技術開発・普及の取組の進捗も踏まえ、2030 年までに 2040 年の電動車の普及目標を設定(規制なし) 米国:(CA 州+15 州)2030 年 Class7-8 の 30%、Class7-8 トラクタの 50%を ZEV 化することを義務付け、Class7-8 は 2045 年以降、コンテナ陸送用ドレージトラックは 2035 年以降、100%ZEV 化 欧州:新車トラックの CO ₂ 排出量を、2019 年に比べ 2025 年に 15%、2030 年には少なくとも 30%の削減を義務づけ タイ:(政府目標)2035 年までに新車販売 100%ZEV 化(BEV・FCV のみ) 内商用車:2025 年 3.1 万台、2030 年 15.6 万台、2035 年 45.8 万台
船舶	2030 年までにゼロエミッションを目標に掲げている地域や、ゼロエミッションに向けての取り組みを実施している地域がある 例)アムステルダム(オランダ)、ノルウェーのフィヨルド
鉄道	ヨーロッパの一部の国では既に新製又は大規模改修時に排ガス規制があるが、ゼロエミッションまでの規制の予定は無い
建設機械	ノルウェーの 7 都市(オスロ、ベルゲン、トロンヘイム、スタバングエル、ドラムメン、トロムセー、クリスティアンサン)で 2030 年までに建設現場のゼロエミッション化の方針、C40 に参加する「オスロ、ブダペスト、ロサンゼルス、メキシコシティ」の 4 都市が 2030 年までに都市の建設プロジェクトからの CO ₂ 排出量を半減させることを目指す”Clean Construction Declaration”を締結
フォークリフト	米国 CA 州 Clean Air Action Plan にて、LA 港、LB 港のフォークリフトを含む全ての荷役機器を 2030 年までにゼロエミッション化する計画が進行している
農業用機械	ディーゼル禁止規制 例)パリ(フランス)2024 年以降

2.1.2 使用環境

各アプリケーションが使用される外気温、高度、保管温度を以下の表に示す。2030 年頃を想定した場合、水素の輸送や貯蔵は、遠隔地もしくは特殊地域への適用に先駆けて、都市部やその近郊地域への導入～拡大が想定されるため、今回は使用外気温については 45℃とし、特殊地域として高度と保管温度については未考慮とした(検討は継続し、今後反映を計画)。

(*) フォークリフトの保管温度最高値が 80℃と突出しているのは船で赤道直下付近を輸送中にコンテナ内に保管された状態を想定

表 2.1.2-1 各アプリケーションの使用環境

アプリケーション	使用外気温	使用高度	保管温度
25 トンクラス大型トラック 44 トンクラス大型トラック	-30~50℃	0~5,000m 3,000~5,000m は出力減を許容し稼働	-30~50℃
内航貨物船	-25~50℃	0~20m	-25~50℃
沿岸旅客船	-25~50℃	0~20m	-25~50℃
鉄道 2 両編成	-30~45℃	0~1,375m	-10~40℃
油圧ショベル 20 トンクラス 油圧ショベル 13 トンクラス	-30~50℃	0~5,000m 高地においては出力減を許容し稼働	-30~50℃
フォークリフト 1-2 トンクラス	-20~40℃	0~500m	-30~80℃
農業用トラクタ 50kW クラス	-30~45℃	0~2,000m	-30~45℃

2.1.3 最大出力

各アプリケーションにおける FC システムとして要求される最大出力を示す。ここでの最大出力は、一般的な使い方を想定した中で、時間制限なども含めた一時的にでも必要とされる出力を示す。ただし、最大出力は FC と 2 次電池のバランスや制御方法により変化する。(その他の出力には連続使用可能な最大出力としての連続定格、冷却能力によって影響される熱定格が存在)

表 2.1.3-1 各アプリケーションの FC システム最大出力

アプリケーション	FC システム最大出力 [kW]
25トンクラス大型トラック	303
44トンクラス大型トラック	400
内航貨物船	600
沿岸旅客船	480
鉄道 2 両編成	400
油圧ショベル 20トンクラス	120
油圧ショベル 13トンクラス	70
フォークリフト 1-2トンクラス	30
農業用トラクタ 50kW クラス	51.5

2.1.4 耐久時間

要求耐久時間は、基本的には通常の使い方において劣化による性能低下によって、それぞれのアプリケーションの一般的な使い方に支障をきたさないことを前提に定めたものとした。

(先に示した目標 I-V 特性における、EOL の I-V 特性においても各アプリケーションの一般的な使い方に支障をきたさないための必要な稼働時間を示したもの)

表 2.1.4-1 各アプリケーションの要求耐久時間

アプリケーション	耐久時間 [hr]	耐久の定義(劣化後に必要な動力要件)
25トンクラス大型トラック 44トンクラス大型トラック	50,000	1%勾配を 90km/h で連続走行可 熱定格動作点で連続走行可
内航貨物船	60,000	600kW で 72 時間、200kW で 24 時間、 100kW で 24 時間の繰り返し出力可
沿岸旅客船	30,000	480kW で 30 分間、60kW で 15 分間 のパターンを 10 サイクル/日出力可
鉄道 2 両編成	50,000	勾配線区を想定し、400kW 連続運転可
油圧ショベル 20トンクラス 油圧ショベル 13トンクラス	10,000	連続掘削 4 時間継続、20 分の走行可
フォークリフト 1-2トンクラス	20,000	既定の作業サイクルパターン連続走行可能
農業用トラクタ 50kW クラス	10,000	50kW 連続運転可

2.1.5 FC システム搭載性

アプリケーション毎に搭載可能なスペースが異なる。従来のパワートレーンシステムの跡地、電動化によって変化する各種部品を勘案し、FC システムの搭載スペースと重量を示す。この許容可能なスペース内に FC システムを搭載し、要求性能を満足することが必要となる。ただし、ここで示す許容可能と想定される容積と重量には、モータ、インバータ、2 次電池等の電動化転換に必要な部品は含まれていない。

表 2.1.5-1 各アプリケーションに搭載可能な FC システム許容スペースと重量

アプリケーション	体積 [L]	重量 [kg]
25トンクラス大型トラック	502	230
44トンクラス大型トラック	502	460
内航貨物船	18,000	11,000
沿岸旅客船	7,000	4,000
鉄道 2両編成 ^{※1,2}	1,300	1,000
油圧ショベル 20トンクラス	1,300	1,000
油圧ショベル 13トンクラス	400	500
フォークリフト 1-2トンクラス	339	500
農業用トラクタ 50kW クラス	125	250

※1 : https://www.jreast.co.jp/press/2020/20201006_4_ho.pdf

※2 : <https://global.toyota/jp/newsroom/corporate/34799387.html>

2.1.6 貯蔵システム搭載性

アプリケーション毎に水素貯蔵システムの搭載スペースと重量を示す。この許容可能なスペース内に水素貯蔵システムに必要な水素量を搭載することが必要となる。ただし、ここで示す許容可能と想定される容積と重量には、配管、減圧弁、車体への搭載部品は含まれていない。

表 2.1.6-1 各アプリケーションに搭載可能な水素貯蔵システム許容スペースと重量

	L [mm]	W [mm]	H [mm]	体積 [L] ()内容器体積	重量[kg]
25トンクラス大型トラック 44トンクラス大型トラック	—	—	—	2,500 ※1 (2,000)	400
内航貨物船	12,000	2,400	2,500	72,000 ※2 (56,520)	※3
沿岸旅客船	6,000	2,000	2,000	24,000 (18,840)	3,000
鉄道 2両編成 (上段/下段:床下/屋上)	1,400 —	3,000 —	700 —	5,086: 床下 2,940+屋上 2,146 (3,993: 床下 2,308+屋上 1,685)	2,000
油圧ショベル 20トンクラス	2,600	750	750	1,463 (1,148)	400 (カウンターウェイト を兼ねる場合 2,000)
油圧ショベル 13トンクラス	2,000	800	800	1,280 (1,005)	
フォークリフト 1-2トンクラス	760	D375	—	84	80
農業用トラクタ 50kW クラス	—	—	—	500	120

※1 全長規制の緩和によるホイールベースの延長を前提に搭載スペースを確保した場合

※2 40 フィートコンテナ相当

※3 内航貨物船は質量許容度あり

2.1.7 航続距離または連続運転時間

各アプリケーションに要求される航続距離または連続運転時間を表 2.1.7-1 に示す。

表 2.1.7-1 各アプリケーションの航続距離または連続運転時間

アプリケーション	1 水素充填あたりの航続距離または連続運転時間または給油サイクル
25トンクラス大型トラック 44トンクラス大型トラック	将来的には1充填当たり航続距離は 1,000km 程度を目指したい
内航貨物船	100m ³ の重油を約 9 日間に一回給油
沿岸旅客船	少なくとも 1 水素充填あたり 8 時間の連続運転を目指したい
鉄道 2 両編成	航続距離: 500km/日(燃費: 5km/kg 電車 2 両編成当たり) 給油サイクル 1 回/日 現状: 軽油 250L/両・回程度 将来的には1充填当たり航続距離は 1,000km 程度を目指したい
油圧ショベル 20トンクラス 油圧ショベル 13トンクラス	8~20 時間 ディーゼル E/G の場合、 給油サイクル 約 300L を 2~3 日に 1 回給油
フォークリフト 1-2トンクラス	連続運転時間 約 4 時間 30 分 ※稼働率 55%として工場 1 直稼働可能
農業用トラクタ 50kW クラス	8 時間以上の連続運転

化石燃料と水素の貯蔵エネルギーの差により、潜在的な航続距離、連続運転時間をそのまま満足することは難しいため、燃料電池を許容するための条件を個別に調査し、2.1.8「その他補足(3) 水素貯蔵方法を考慮した場合の航続距離または連続運転時間」に整理した。

2.1.8 その他補足

(1) 特殊環境

FC システムの用途拡大に伴い、それぞれのアプリケーションの特徴に応じた、特殊環境(稀にさらされる過酷な環境など)が必要となってくる。本格的な全面展開(燃料の輸送、貯蔵、供給体制が特殊地域への適用を済ませた状態)時に考慮が必要とされる特殊環境についても表 2.1.8-1 に明示する。

ただし、今回提示の目標は、各アプリケーションの共有とするコアの部分(大部分を占める一般的な使い方)と都市およびその近郊での稼働前提としたため、特殊環境は未考慮である。これらを考慮した場合の目標の在り方などは、アプリケーション毎に議論を継続し、必要に応じて展開を予定する。

表 2.1.8-1 各アプリケーション特有な環境

アプリケーション	特有な環境
25トンクラス大型トラック 44トンクラス大型トラック	地域によっては路面凍結防止剤による塩害 冠水路走行の必要な地域での渡渉
内航貨物船、沿岸旅客船	大気中の海塩粒子、船体の動揺、エンジン起因の振動
鉄道 2 両編成	狭小トンネル走行時の安全性確認 (吸気側圧力変動、温度変化、吸排気の短絡現象(温度、酸素濃度)、異常時の水素タンク緊急放出弁(PRD)着火時の火炎の状況)
油圧ショベル 20トンクラス 油圧ショベル 13トンクラス	湿地、粉塵、傾斜地(30 度程度)、振動衝撃
フォークリフト 1-2トンクラス	冷蔵庫、冷凍庫内使用あり
農業用トラクタ	泥・埃環境

(2) 氷点下起動要件

各アプリケーション共に氷点下環境でも使用されることになるため、氷点下起動に関する要件を表 2.1.8-2 にまとめた。いずれのアプリケーションに対しても数分以上の暖機運転が許容される。

表 2.1.8-2 各アプリケーションの氷点下起動要件

アプリケーション	氷点下起動要件
25トンクラス大型トラック 44トンクラス大型トラック	氷点下でも速やかな起動が求められる -30°C以下となる厳寒環境では窓ガラスの視界確保、室内温度上昇のため 20 分程度は暖機する -10°C程度の環境では起動後すぐ走行開始、走行と暖機を兼ねるのが一般的
内航貨物船、沿岸旅客船	ある程度の暖機は許容
鉄道 2 両編成	暖機する時間は若干(10 分程度)であれば許容される 極寒地を走行する現状のディーゼルカーも若干暖機を行って起動する例から判断 極寒地での対応としては FC の凍結により壊れないことも重要
油圧ショベル 20 トンクラス 油圧ショベル 13 トンクラス	数分から数十分の暖機運転を行う
フォークリフト 1-2 トンクラス	ある程度の暖機は許容
農業用トラクタ 50kW クラス	1~2 分程度の暖機の後作業ができれば特に問題にはならない

(3) 水素貯蔵方法を考慮した場合の航続距離または連続運転時間

化石燃料に対してエネルギー密度が小さい水素を貯蔵するために、どのような条件が整備されるような運転を許容できるか、個別にヒアリングした結果を表 2.1.8-3 に示す。

表 2.1.8-3 各アプリケーションの運転時間/距離の緩和条件

アプリケーション	航続距離/ 連続運転時間	燃料補給	備考
25トンクラス大型トラック 44トンクラス大型トラック	1,000km	水素 ST	国内規格は海外より一回り小さい。搭載スペース増加のため規制緩和※1も必要。
内航貨物船	5 日	水素 ST	内航貨物船は質量許容
沿岸旅客船	2 日(将来 7 日)	移動充填車 水素充填船	沿岸客船は 2~3 日運用を稼働率考慮し選定 将来貯蔵密度向上で小型化期待
鉄道 2 両編成	500km	基地 ST	屋根上搭載検討し高圧貯蔵で 500km 走行を目標。運用で充填回数増やせる。1,000km は電車置換想定
油圧ショベル 20 トンクラス 油圧ショベル 13 トンクラス	4hr	移動充填車	20t は搭載量増加見直し。 移動充填車などがあれば半日運用可
フォークリフト	4.5hr	水素 ST(自前)	LiB 車に対応し、従来比 2 倍
農業用トラクタ 50kW クラス	4hr	移動充填車	泥濘地での沈み込みのため質量増加はネック。 移動充填車などがあれば半日運用可

※1 全長+2m(トラクター)、+1m(単車)、質量+2t を涉外中

移動式充填機などの、運用現場での簡易な水素充填手段が整備された場合、従来の化石燃料での運用に対して大幅に短い時間での運用も許容される可能性をご示唆いただいている。しかしながら、従来並みの運用に改善する潜在的ニーズはあることを認識する必要がある。

図 2.1.8-1 と図 2.1.8-2 に建機及び船舶の給油と将来望まれる水素充填手段のイメージについて示す。建機その他農機も含め、作業現場で充填可能な手段の開発・整備が進んだ場合水素・燃料電池適用の敷居が下がることが期待される。



図 2.1.8-1 建機の給油・水素充填のイメージ

図 2.1.8-2 船舶の給油・水素充填のイメージ

上記の条件において 2040 年 FC の燃費から算出した必要水素量から、各アプリケーションから求められる質量貯蔵密度、体積貯蔵密度を算出し、表 2.1.8-4 ならびに図 2.1.8-3 に示す。

表 2.1.8-4 各アプリケーションの水素貯蔵諸元

アプリケーション	航続距離/ 運転時間	燃費 ※1	必要 水素量 [kg]	許容搭載 質量 [kg]	許容搭載スペース (容器体積) [L]	質量貯蔵 密度 [wt%]	体積貯蔵 密度 [g-H2/L]
25トンクラス大型 トラック 44トンクラス大型 トラック	1,000km	14.4 km/kg-H2	70	400	2,500 (2,000)	17.4	34.8
内航貨物船	5日(120hr)	0.05hr/kg-H2	2416	※2	72,000 (56,520)	17 ※2	42.7
沿岸旅客船	2日(14hr)	0.06hr/kg-H2	231	3,000	24,000 (18,840)	7.7	12.3
鉄道 2両編成	414km※3 (500km)	3.6km/kg-H2	114 (138)	2000	5,086 (3,993)	5.7 (6.9)	28.6 (32.1)
油圧ショベル 20トンクラス	4hr	0.22hr/kg-H2	18	400	1,463(1,148)	4.5	15.7
13トンクラス		0.35hr/kg-H2	11	400	1,280(1,005)	2.8	11.3

フォークリフト	4.5hr	—	2	80	(84)	2.5	23.8
農業用トラクタ 50kW クラス (短い畑)	4hr	0.45hr/kg-H2	9	120	500(393)	7.3	22.4
(長い畑)		0.39hr/kg-H2	10	120	500(393)	8.6	26.3

※1 2040年IVによるシミュレーションによる

※2 内航貨物船は質量許容度があるため、質量貯蔵密度は液体水素の2030年仮目標値を仮置きした。

※3 2.2.3節にて成立性検討のモードにて8時間走行の結果を示す。合わせて500kmを連続で走行するケースを()内に示す。

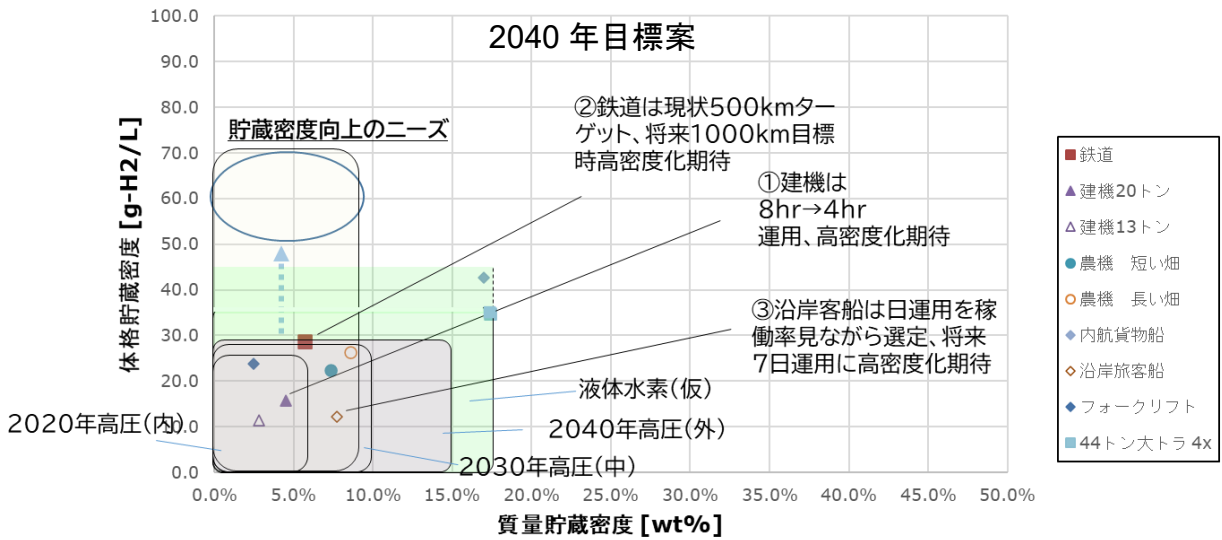


図 2.1.8-3 各アプリケーションの貯蔵密度イメージ

上記のケースには体積貯蔵密度改善の潜在的ニーズを内包していると考えられる。重量制約は少なく、且つ限られた体積に多くの水素搭載が必要な用途に対しては、将来の水素貯蔵材貯蔵密度の画期的な拡大技術開発が期待される。

今後、更に詳細にアプリケーションとの整合性も確認していく。

2.2 要求 I-V 特性の検討

2.2.1 2030 年頃の目標設定の進め方

提示する要求 I-V 特性は将来想定される各アプリケーションの製品要求を満足する共通仕様でなければならない。共通的な目標とする I-V 特性を導出するため、各アプリケーションでの FC スタックの使われ方が包含されると考えられる大型トラックを対象に目標値を算出し、その目標値が他のアプリケーションの製品要件を満たし得ることを確認（システム成立性検証）して共通目標 I-V 特性とすることにした。

2.2.2 大型トラック

(1) 大型トラックの製品要件とシステム構成

表 2.2.2-1 に大型トラックの製品要件を示し、表 2.2.2-2 に大型トラックのシステム構成を示す。これらは I-V 特性目標を算出するための前提条件となる。表 2.2.2-1 に示されるように大型トラックは耐久時間が 5 万時間と長く、かつ耐久走行後において高速坂路による高負荷走行条件での走破性が要求される。また、システムの搭載要件が厳しく、限られたスペースに搭載可能な FC スタックと 2 次電池、冷却系で製品要求を満たす必要があり、他のアプリケーションと比較しても厳しい要求となっている。

FC スタック数は、車両クラス毎に搭載スペースへのスタック搭載可能性の目安値として設定した。セル面積・枚数に関しては既存の FC スタックの値を用いている。2 次電池は、走行負荷に対し FC と 2 次電池で発電分担することで、FC の高温化や劣化を回避しながら高負荷走行の走破性を確保し、更に制動時のエネルギー回生を行いながらシステム効率を向上させるために用いられる。今回の計算前提となるシステム構成では、システム出力と FC 熱定格出力の差分の 100kW で 2 次電池の 40% のエネルギーを用いて約 20 分間アシスト可能な容量設定とした。また、冷却系に関しては、各車両クラスでの搭載性と動作環境での冷却必要量を考慮した冷却能力要求値の設定とした。

以上から大型トラックの代表的な 25 トンクラスと最大の 44 トンクラスを想定した場合、搭載制約と必要出力からスタック当たりの熱定格出力目標が 44 トンクラスでは 75kW であるのに対し、25 トンクラスでは 100kW とより大きな FC 出力密度が要求される。このような理由から 25 トンクラスにまず着目し I-V 特性の目標値を導出する。44 トンクラスについては、導出された I-V 特性目標値と表 2.2.2-2 のシステム構成で製品要求が満たされるか確認する。

表 2.2.2-1 大型トラックの製品要件（計算前提）

車種	システム出力 FC 熱定格出力	耐久走行パターン	動力性能要件	耐久要求時間
25 トンクラス	300kW 200kW	WHVC, JH25	耐久要求時間走行後、1% 勾配路を 90km/h で連続走 行可能	5 万時間
44 トンクラス	400kW 300kW	↑	↑	↑

表 2.2.2-2 大型トラックのシステム構成（計算前提）

車種	セル面積・枚数	FC スタック数	2 次電池容量	冷却系能力
25 トンクラス	273cm ² ・330 枚/スタック	2 基	90kWh	3.5kW/°C以内
44 トンクラス	↑	4 基	↑	7kW/°C以内

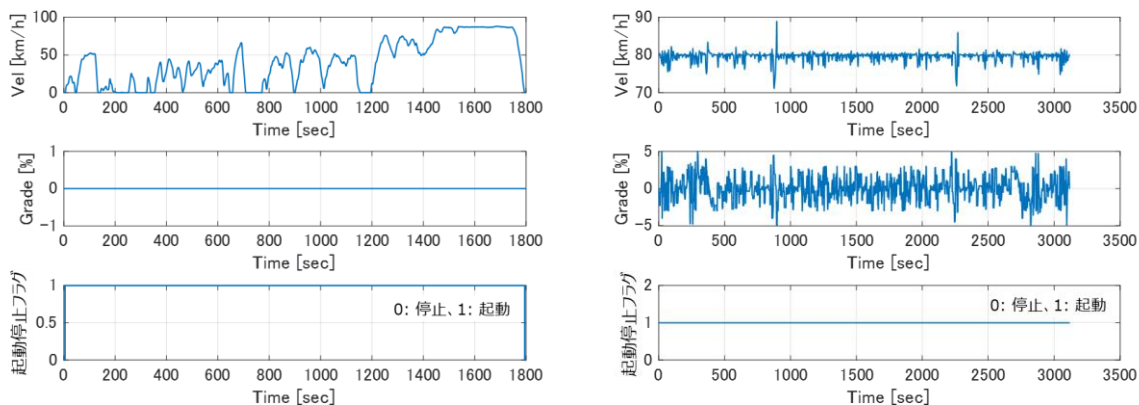


図 2.2.2-1 大型トラックの耐久走行パターン（左：WHVC／右：JH25）

(2) 要求 I-V 特性の導出

要求 I-V 特性の算出は、BOL I-V 特性の候補を複数仮定し耐久走行シミュレーションにより各 I-V 特性に対し性能低下を見積もり、性能低下後の EOL I-V 特性で動力性能要件を満たすものを抽出することによって行う。耐久走行シミュレーションでは、耐久走行パターンを耐久要求時間繰り返し走行した場合の触媒劣化による I-V 特性低下を予測する。動力性能要件は、EOL I-V 特性と所定の冷却能力で高速登坂条件（90km/h、1%勾配）を連続走行の可否により判定する。

耐久走行パターンは大型トラックの走行パターンである WHVC と JH25 を用いる。WHVC は市街地走行、JH25 は高速走行を想定しており、これらで標準的な走行パターンを一通り模擬すると考えられる。しかし、この他に山岳路や長距離輸送パターンなど、より高負荷・高温条件で使われるケースも考えられる。よってこれらの高負荷走行パターンを耐久パターンとして考慮することは今後検討の余地がある。

一方、電解質膜の耐久性に関しては、電解質膜が暴露される劣化ストレス条件から耐久性要求値を目標値として提示する。このため、耐久走行パターンの他、より高温条件となる高負荷走行パターンも含めてシミュレーションし、スタック電流・セル電圧・冷却水温度・空気極側湿度を劣化ストレス条件として提示する。

I-V 特性は、(1)式を用いて既存のベース I-V 特性に対し、活性・ガス拡散抵抗・オーム抵抗（以下ではこれらをまとめて MEGA 物性値と呼ぶ。）の各変化量を与え、I-V 特性の候補（サンプル）を複数設定する。各サンプルに対し EOL I-V 特性を算出し、動力性能要件を判定する。要件を満たす I-V 性能候補の集合の中から活性が最も低いサンプル、ガス拡散抵抗が最も高いサンプル、等を提示し目的に応じ取捨選択する。

$$V = V_{OCV} - R_{\Omega}I - \frac{RT_{cl}^{out}}{\alpha F} \log\left(\frac{I}{i_0}\right) - \frac{RT_{cl}^{out}}{\alpha F} \log\left(\frac{C_{ref}}{C_{O_2} - R_{gas} \frac{I}{4F}}\right) \quad (1)$$

ここで、 I は電流密度、 V はセル電圧である。活性を表す指標の交換電流密度を i_0 、ガス拡散抵抗を

R_{gas} 、オーム抵抗を R_{Ω} とおいた。その他の記号は表 2.2.2-3 にまとめた。このように生成した I-V 特性候補の例を図 2.2.2-2 に示す。

表 2.2.2-3 式(1)中の記号

記号	定数名
V_{OCV}	開回路電圧
R	気体定数
T_{cl}^{out}	冷却水出口温度
α	パラーボルマー式の移動定数
F	ファラデー定数
C_{ref}	基準酸素濃度
C_{O_2}	セル面内代表酸素濃度

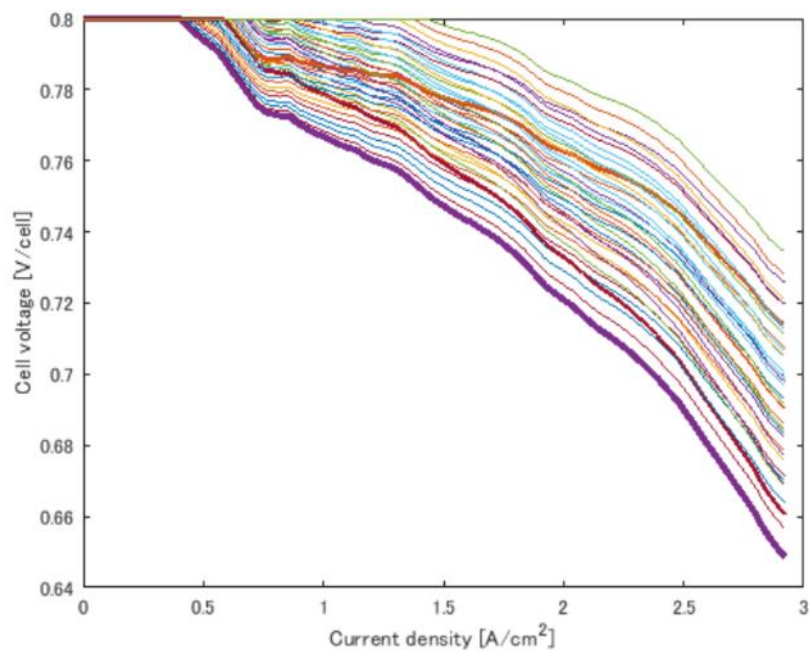


図 2.2.2-2 I-V 特性候補の例

(3) 動力性能要件

動力性能要件は所定の走行条件での車両走破性の要件を与えており、これにより FC の I-V 特性が規定される。I-V 特性は発電負荷 (\propto 走行負荷) の増加に伴い発熱量が増加する性質を有しているが、FC (主に触媒) の劣化により I-V 特性が低下した場合は、同一負荷条件でも発熱量が上昇する (図 2.2.2-3)。このとき、FC の発熱量がラジエータの放熱量を常に上回ると FC の水温上昇が抑えられなくなり走行不能となる。よって FC 車両の動力性能要件は、ラジエータ放熱能力の制限の下で耐久後の EOL I-V 特性に対応させることができる。劣化シミュレーションにより BOL I-V 特性は EOL I-V 特性と対応づけられるため、耐久要件を満たす BOL I-V 特性が探索できる。

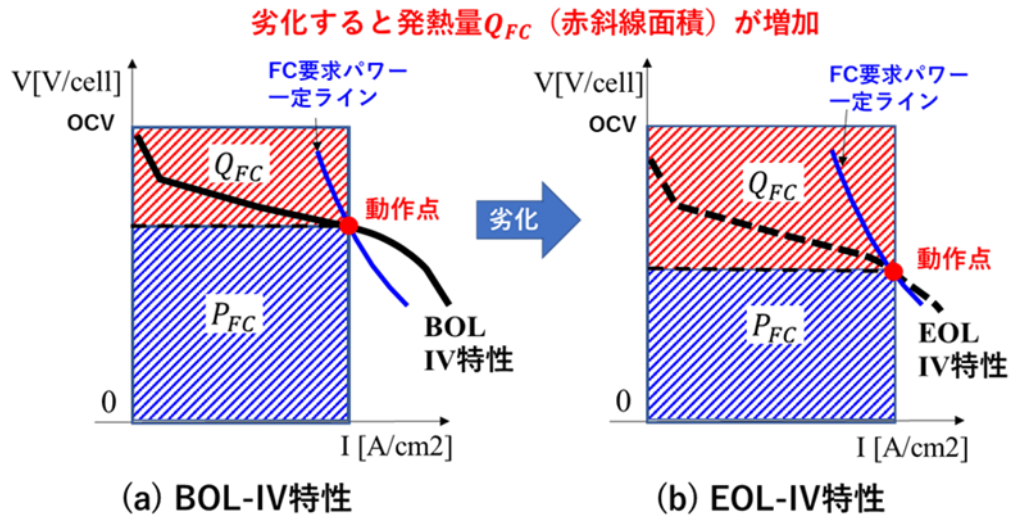


図 2.2.2-3 I-V 特性の低下に伴う発熱量増加

(4) 計算手順

以下に示す計算手順により、耐久性の要求値を満足する I-V 特性を探索する。

- ① 車両要求値（諸元、耐久時間、耐久走行パターン、動力性能要件）を設定。
- ② 活性指標である交換電流密度(i_0)、プロトン抵抗等の抵抗成分を含むオーム抵抗(R_Ω)、ガス拡散抵抗(R_{gas})をパラメータとして各上下限の範囲から抽出しその値の組み合わせから I-V 特性を式(1)に基づいて生成。
- ③ 初期 I-V 特性に対し、車両が耐久走行パターンを耐久時間繰り返し走行したときの FC 劣化による I-V 特性低下をシミュレーションで算出。
- ④ 耐久時間後の I-V 特性で車両が動力性能要件を満足するか判定。

(5) 要求 I-V 特性

計算結果を図 2.2.2-4 に示す。図 2.2.2-4 (a)の 3 次元平面上の各点は、耐久要求値を満たす MEGA 物性値（活性向上率、オーム抵抗低減代、ガス拡散抵抗低減代）の組み合わせを示している。各点が一本の I-V 特性に対応しており、図 2.2.2-4 (b)は耐久要求値を満たす I-V 特性の集合を表している。この結果から、要件を満たす I-V 特性は赤いラインのように「高活性、高抵抗なもの」から、青いラインのように「低活性、低抵抗なもの」まで複数存在することが分かる。これらの I-V 特性の候補から活性の最も低い I-V 特性を抽出し目標 I-V 特性とした(前節の図 1.3-1 を引用)。

目標 BOL I-V 特性に対し、25 トンクラスで WHVC と JH25 による繰り返し走行をそれぞれ耐久時間行った後の EOL I-V 特性を図 2.2.2-5 に示す。起動停止を含む耐久走行パターンの違いにより同一 BOL I-V 特性に対し EOL-IV 特性は異なる。各 EOL I-V 特性ライン上に、動力性能要件の 90km/h、1%勾配を走行するのに必要な動作点（熱定格動作点）を赤丸で示す。この中で劣化度合いが多い WHVC 走行後の熱定格動作点の電流密度が最も大きく、ラジエータの放熱必要量も大きくなることが推察される。同様に 44 トンクラスで行った結果を図 2.2.2-6 に示す。また、図 2.2.2-5、図 2.2.2-6 中の I-V 特性上の点線は今回のシミュレーションで使われなかった領域を表しているが、アプリケーションや制御設計によって異なることを付記しておく。

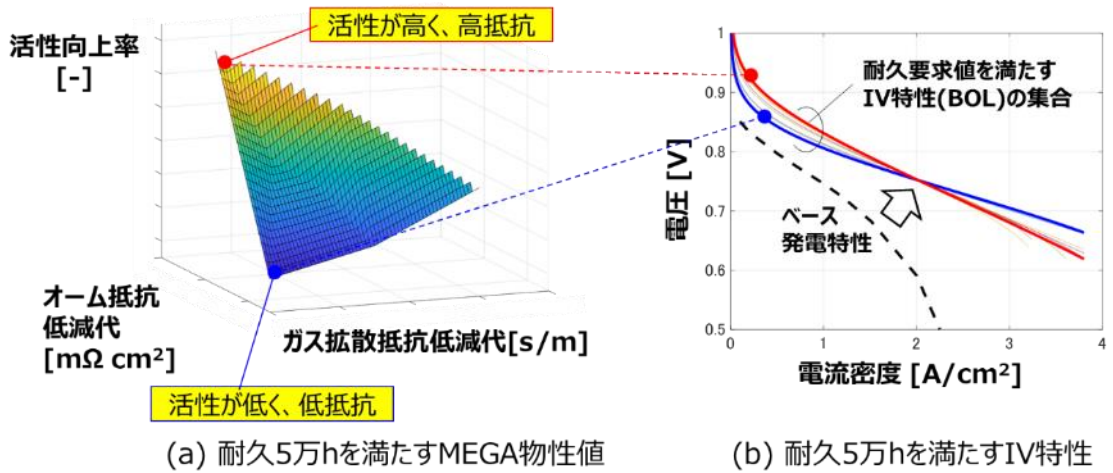


図 2.2.2-4 耐久 5 万 hr を満たす MEGA 物性値と I-V 特性

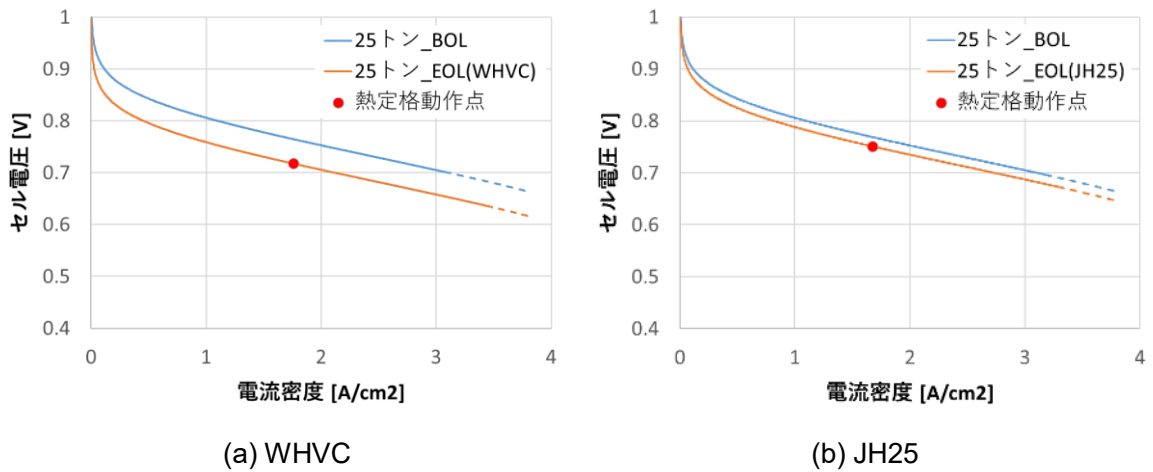


図 2.2.2-5 BOL I-V 特性と EOL I-V 特性 (25 トン)

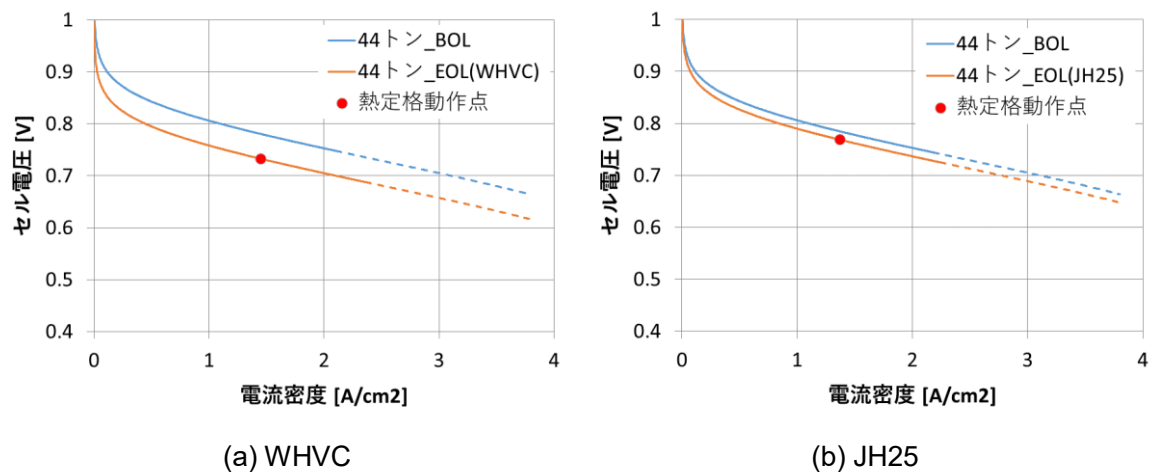


図 2.2.2-6 BOL I-V 特性と EOL I-V 特性 (44 トン)

目標 I-V 特性に対し WHVC を耐久目標時間繰り返し走行した後の EOL I-V 特性について、FC ネット出力に対する FC 発熱量を求めた結果を図 2.2.2-7 に示す。熱定格動作点での FC 発熱量は、25 トンクラスでは 210kW、44 トンクラスでは 336kW であり、それぞれに対応した FC 冷

却能力が求められる。実際、外気温を 45°Cと仮定した場合、FC 最大水温が 105°Cにおいてラジエータ冷却能力として 25 トンクラスでは 3.5kW/°C、44 トンクラスでは 5.6kW/°Cが求められる。これらは表 2.2.2-2 のシステム構成で想定した冷却能力の範囲内であることが確認できる。したがって、25 トンクラスの製品要求から導出された I-V 特性目標値が 44 トンクラスの製品要求を満たすことが確認できた。

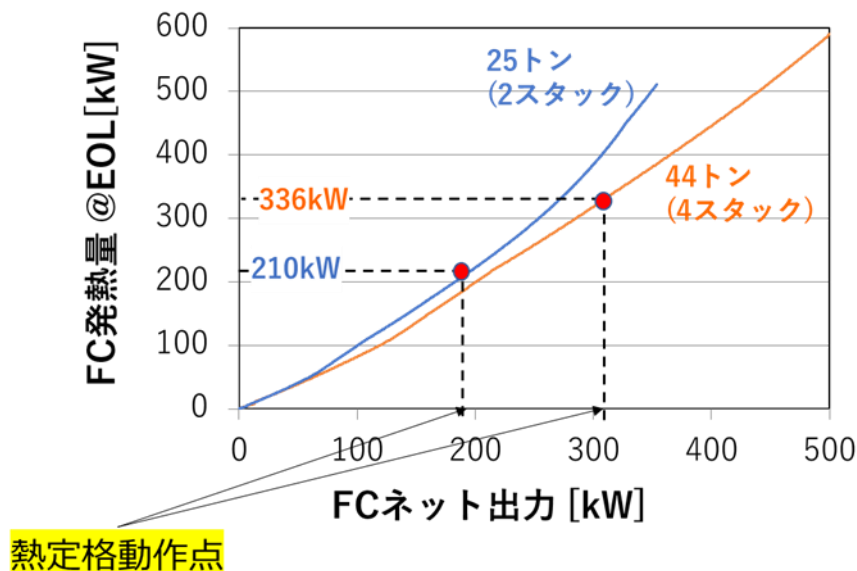


図 2.2.2-7 EOL I-V 特性(WHVC 耐久走行後)における熱定格動作点での発熱量

(6) 今後の課題

- 電解質膜の耐久性に関しては、(2) で述べた通りここまでの検討では考慮されていない。従って、耐久走行パターンをはじめ高負荷走行パターンでの電流、電圧、温度データにより電解質膜への耐久要件を示す必要がある。このため、耐久パターンの WHVC と JH25、高負荷走行パターンの山岳路と長距離輸送パターンでの走行シミュレーションにより求めた頻度分布データを次節に示す。
- 大型トラックは消防車等の特殊用途を含めると多様な形態での使用に応える必要があり、搭載要件は更に厳しい。これには 2 次電池の小型化も考慮しながら、出力密度向上による FC の小型化や、FC の運転温度を増加させるなど冷却性能向上によるラジエータを含めたシステム小型化にも取り組んでいく必要がある 2030 年頃の目標設定では 44 トントラックは 4 スタックが前提であるが 2 スタックでの成立性が望まれている (2030 年以降の課題は 2.2.4 参照)。
- 大型トラックの代表マーケットの 1 つである EU における HD トラック (HDT) 販売シェアを図 2.2.2-8 に示すが、EU では HDT に占めるトラクタータイプの比率が年々増加しており、2014 年時点で約 45%とほぼ過半数を占める。また図 2.2.2-9 より、2014 年時点でトラクタータイプのエンジン出力の約 90%以上が 300-400kW である。GVW40 トンを超えることもあるトラクタータイプでは、大出力の動力源が望まれていると思われる。図 2.2.2-7 に示すように、動力源の出力増加に伴い発熱量も増加するため、特にトラクタータイプでは、FC システムの高温作動化が強く望まれている (2030 年以降の課題は 2.2.4 参照)。

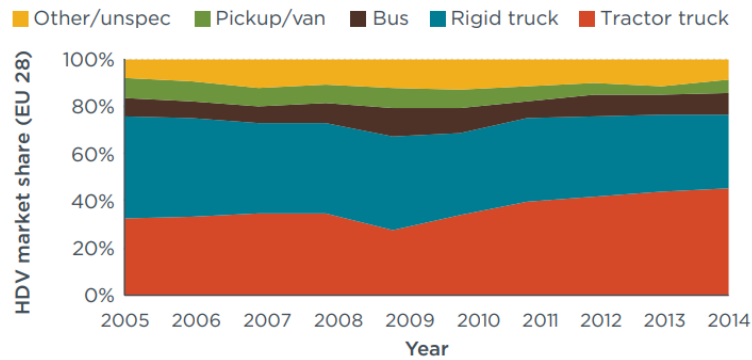


図 2.2.2-8 EUにおけるHDT販売シェア [1]

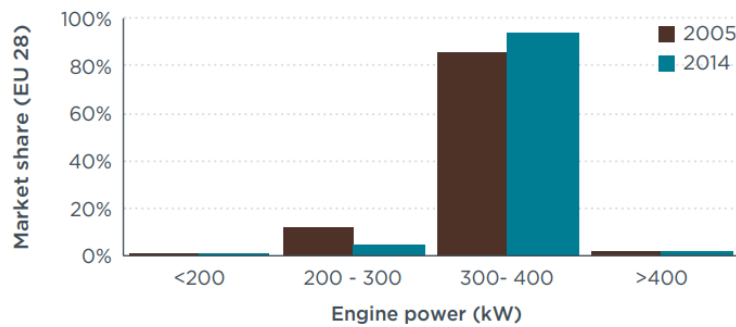


図 2.2.2-9 EUにおけるTractor truck用エンジン販売シェア [1]

(参考文献)

[1] ICCT, “Overview of the heavy-duty vehicle market and CO2 emissions in the EU” (2015)

2.2.3 他のアプリケーションのシステム成立の検討

ここでは、他のアプリケーションについて、2030年頃を想定したシステム構成で、2.2.2「大型トラック」で試算した目標 I-V 特性を用いた場合に、耐久要求を満足するかどうかについて、2.2.2と同様のシミュレーションを用いて試算する。具体的には、2.2.2「大型トラック」で試算した目標 I-V 特性にて、さらにスタック数、冷却性能、2次電池について性能を振ったシステム毎に、耐久走行パターンを耐久時間分実施し、動力性能判定にて耐久要求を満足するか否かを判定する。そして、耐久要求を満足するシステム構成が、2030年頃想定システム範囲に含まれる場合、2.2.2「大型トラック」で試算した目標 I-V 特性で一本化が可能であると判断する。

(1) 各アプリケーションのシステム構成

今回試算では、表 2.2.3-1～表 2.2.3-3 に示す 2030年頃を想定したシステム構成を前提とする。FC スタック数、冷却性能、2次電池性能については、性能を振ってシミュレーションを実施し、表 2.2.3-1～表 2.2.3-3 に示す 2030年頃の想定システム範囲内に、耐久性能を満足するシステム構成が存在するかを検証する。ただしフォークリフトについては、すでに第二世代の FC システムでも耐久要求にミートしているため、今回試算の対象外とする。

表 2.2.3-1 システム構成の試算条件と 2030 年頃のシステム範囲：スタック

アプリケーション	システム構成の試算条件			2030 年頃の想定システム範囲 想定搭載可能数
	FC スタック数	面積・枚数	I-V 性能	
内航貨物船	3~6 基	273cm ² 330 枚/基 ^{※1}	2.2.2 にて試算の I-V 特性	46 基以下
沿岸旅客船	2~5 基			18 基以下
鉄道 2 両編成	2~10 基			4 基以下
油圧ショベル 20 トンクラス	1~2 基			2 基以下
油圧ショベル 13 トンクラス	1 基			1 基以下
農業用トラクタ 50kW クラス	0.32~1 基			0.32 基以下

※1：Gen2 MIRAI のセル仕様を想定

表 2.2.3-2 システム構成の試算条件と 2030 年頃のシステム範囲：冷却性能

アプリケーション	システム構成の試算条件 冷却性能	2030 年頃の想定システム範囲 想定冷却性能
内航貨物船	100 kW/°C ^{※2}	制限なし
沿岸旅客船	100 kW/°C ^{※2}	制限なし
鉄道 2 両編成	6~12 kW/°C	10 kW/°C 以下
油圧ショベル 20 トンクラス	1.27(現状)~2.55 kW/°C	1.82 kW/°C 以下
油圧ショベル 13 トンクラス	1.0(現状)~1.82 kW/°C	1.82 kW/°C 以下
農業用トラクタ 50kW クラス	1.14(現状)~1.71 kW/°C	1.71 kW/°C 以下

※2：海水を使うことで十分な冷却が可能。シミュレーションでは極端に大きい値を設定することで模擬

表 2.2.3-3 システム構成の試算条件と 2030 年頃のシステム範囲：2 次電池

アプリケーション	システム構成の試算条件 2 次電池性能	2030 年頃の想定システム範囲 想定性能
内航貨物船	2 次電池なしを設定 ^{※3}	制限なし
沿岸旅客船	2 次電池なしを設定 ^{※3}	制限なし
鉄道 2 両編成	出力 800kW 容量 240kWh ^{※4}	-
油圧ショベル 20 トンクラス	出力 75~225kW 容量 2.6~7.8kWh	出力 75kW 容量 2.6kWh
油圧ショベル 13 トンクラス	出力 75~225kW 容量 2.6~7.8kWh	出力 75kW 容量 2.6kWh
農業用トラクタ 50kW クラス	出力 0~50kW 容量 0~5kWh	-

※3：船舶では回生はなく、内航貨物船と沿岸旅客船での 2 次電池のシステムにおける用途は、微小な変動吸収のみのため、耐久への寄与度は小さい。したがってシミュレーションでは、FC 要求出力を与え、2 次電池はなしの設定にて実施

※4：FC と 2 次電池の出力分配・回生制御は OEM にて実施、したがってシミュレーションでは、FC 要求出力を与え、2 次電池はなしの設定にて実施

(2) 各アプリケーションの耐久条件

各アプリケーションの通常の使われ方として、表 2.2.3-4~表 2.2.3-7 に示す耐久走行パターンを定義し、各アプリケーションの最も厳しい使われ方として、表 2.2.3-4~表 2.2.3-7 に示す動力性能判定パターンを定義する。

この耐久走行パターンを耐久時間分繰り返すことで市場での劣化を模擬し、そしてその劣化状態にて動力性能判定パターンを走破出来た場合に、耐久要求を満足できたと判定する。

表 2.2.3-4 耐久条件：船舶

	内航貨物船	沿岸旅客船
耐久時間	60,000 時間	30,000 時間
耐久走行パターン	<p>国内の貨物輸送を想定し、3 日航行+揚荷 1 日+積荷 1 日の計 5 日の作業パターン 起動停止は 1 回/1 作業パターン(5 日=120 時間)</p>	<p>国内の旅客輸送(例:島 to 島)を想定し、航行⇒乗/下船の停泊を繰り返すパターン 起動停止は 1 回/1 日(7.5 時間)</p>
動力性能判定パターン	耐久走行パターンと同一	耐久走行パターンと同一

表 2.2.3-5 耐久条件：鉄道

	鉄道 2 両編成
耐久時間	50,000 時間
耐久走行パターン	<p>都市部近郊を想定し(駅間 3km 程度)、約 9 割が平坦線区、約 1 割が勾配線区となる路線 1 線区内では、一般的な電車で最高速である約 100km/h まで到達し、すぐに減速 起動停止は、2 回/1 日(=8 時間×2)</p>
動力性能判定パターン	耐久走行パターンと同一

表 2.2.3-6 耐久条件：建機

	油圧ショベル 20t クラス	油圧ショベル 13t クラス
耐久時間	10,000 時間	
耐久走行パターン	<p>10t ダンプにショベルで土砂などを積み込み(10 回で満載)その後、走行・軽負荷作業・アイドルを実施。これを耐久時間分繰り返す。起動停止は、2 回/1 日 (=4 時間×2)</p>	
動力性能判定パターン	<p>A かつ B が成立すること A: 連続掘削 4 時間連続作業者の休憩を考慮した、最悪想定 B: 連続走行 国内で最長想定の 20 分を高速で走破、その後は中速を維持</p>	

表 2.2.3-7 耐久条件：農機

	農業用トラクタ 50kW クラス	
耐久時間	10,000 時間	
耐久走行パターン	<p>負荷の高い耕うん作業について A・B を想定しそれぞれ実施 起動停止は、2 回/1 日 (=4 時間×2)</p> <p>A：短めの畑→旋回多く負荷変動多</p> <p>B：長めの畑→高負荷が継続</p>	
動力性能判定パターン	連続耕うんを想定し、50kW 連続運転で判定	

(3) 耐久成立性の検討結果

2030 年頃を想定したシステム構成において耐久走行後に動力性能を満たせるかをシミュレートし、その結果が 2030 年頃想定システム範囲に対してどのような関係になっているかについてまとめた。その結果、今回対象とした全てのアプリケーションにて耐久性を満足する構成が存

在することが分かった。各アプリケーションについて、耐久性を満足するシステム構成を表 2.2.3-8 に示す。

表 2.2.3-8 耐久成立性を満足するシステム構成の範囲

アプリケーション	システム構成		
	FC スタック数	冷却性能	2 次電池性能
内航貨物船	4~46 基	100kW/°C	-
沿岸旅客船	3~18 基	100kW/°C	-
鉄道 2 両編成	4 基	10kW/°C	-
油圧ショベル 20 トンクラス	1 基	1.8-1.82 kW/°C	75kW 2.6kWh
	2 基	1.6-1.82 kW/°C	75kW 2.6kWh
油圧ショベル 13 トンクラス	1 基	1.45-1.82 kW/°C	75kW 2.6kWh
農業用トラクタ 50kW クラス(短い畑)	0.32 基	1.3-1.71 kW/°C	0kW 0kWh
	0.32 基	1.14-1.71 kW/°C	50kW 5kWh
農業用トラクタ 50kW クラス(長い畑)	0.32 基	1.5-1.71 kW/°C	0kW 0kWh
	0.32 基	1.3-1.71 kW/°C	-

(4) 各アプリケーションの使われ方

ここでは、材料開発における評価プロトコル検討の一助となるよう、各アプリケーションでの使われ方についてまとめる。

①対象システムの定義

(2) にて検討したシステム構成のうち、耐久を満足する以下を対象とする。

表 2.2.3-9 使われ方まとめの対象システム

アプリケーション	システム構成			走行パターン
	FC スタック数	冷却性能	2 次電池性能	
25 トンクラストラック	表 2.2.2-2 に記載のシステム			WHVC, JH25 山岳路, 長距離輸送
44 トンクラストラック	表 2.2.2-2 に記載のシステム			WHVC, JH25 山岳路, 長距離輸送
内航貨物船	4 基	100kW/°C	-	表 2.2.3-4 耐久走行パターン
沿岸旅客船	3 基	100kW/°C	-	表 2.2.3-4 耐久走行パターン
鉄道 2 両編成	4 基	10kW/°C	-	表 2.2.3-5 耐久走行パターン
油圧ショベル 20 トンクラス	1 基	1.8kW/°C	75kW 2.6kWh	表 2.2.3-6 耐久走行パターン
油圧ショベル 13 トンクラス	1 基	1.45kW/°C	75kW 2.6kWh	表 2.2.3-6 耐久走行パターン
農業用トラクタ 50kW クラス	0.32 基	1.71kW/°C	-	表 2.2.3-7 耐久走行パターン

②スタックあたり出力の時間分布

各アプリケーションの耐久時間内における、各出力帯での総使用時間は図 2.2.3-1 に示すとおり

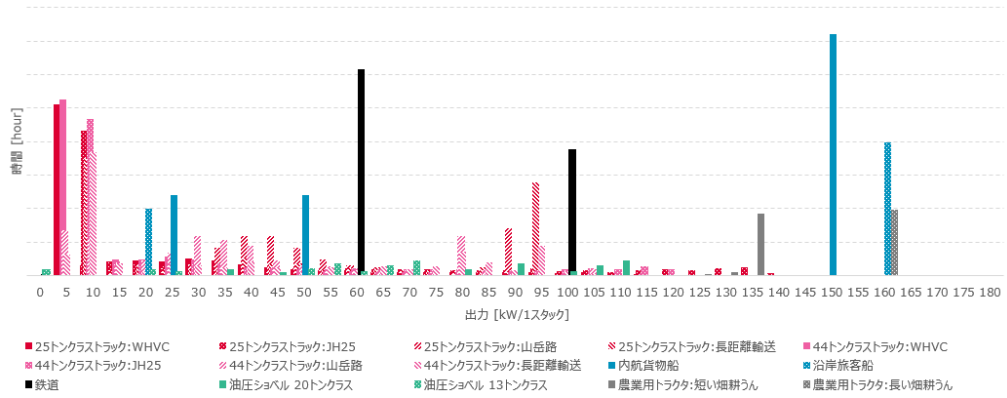


図 2.2.3-1 スタック 1 基あたり出力の時間分布

③電圧の時間分布

各アプリケーションの耐久時間内における、各電力帯での総使用時間は図 2.2.3-2 に示すとおり

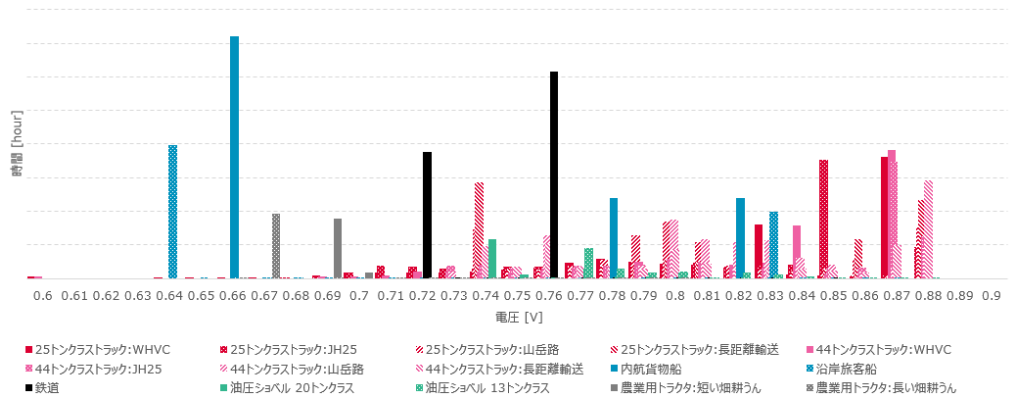


図 2.2.3-2 電圧の時間分布

④電流密度の時間分布

各アプリケーションの耐久時間内における、各電流密度帯での総使用時間は図 2.2.3-3 に示すとおり

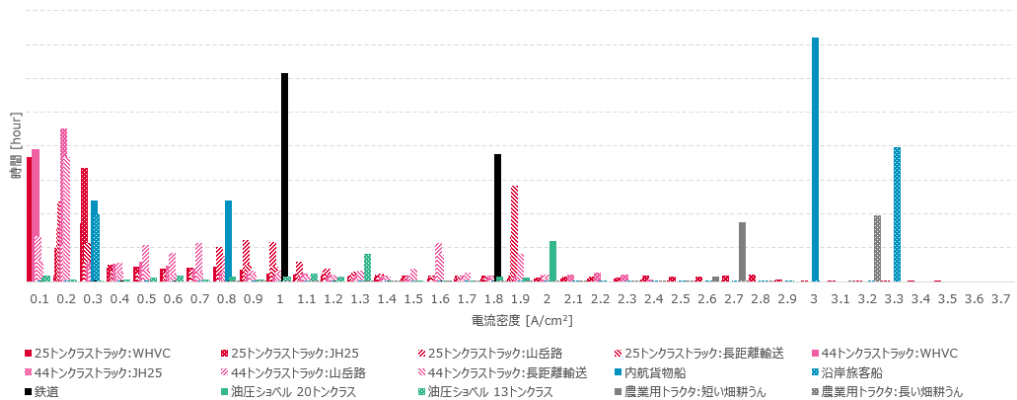


図 2.2.3-3 電流密度の時間分布

⑤FC 水温の時間分布

各アプリケーションの耐久時間内における、各 FC 水温帯での総使用時間は図 2.2.3-4 に示すとおり

り

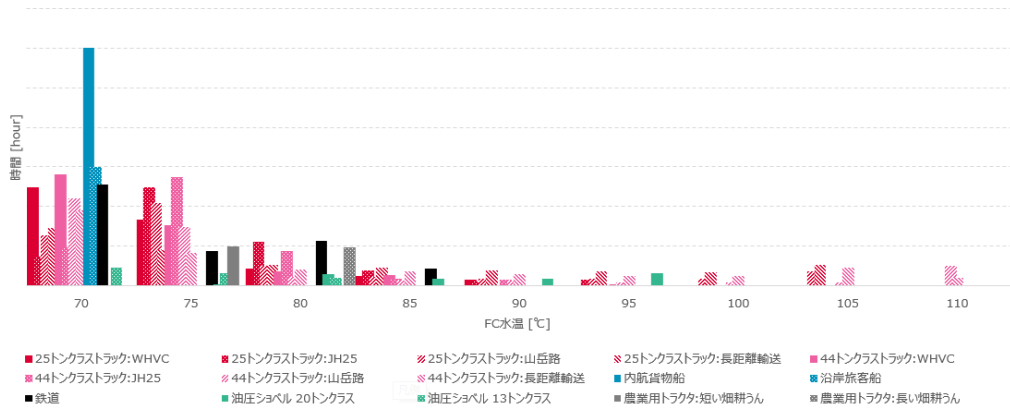


図 2.2.3-4 FC 水温の時間分布

⑥スタック内平均湿度の時間分布

各アプリケーションの耐久時間内における、各湿度帯での総使用時間は図 2.2.3-5 に示すとおり

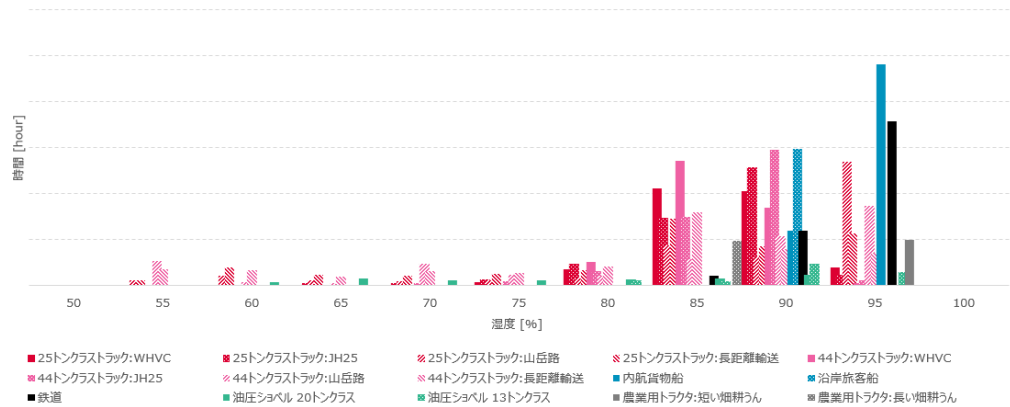


図 2.2.3-5 スタック内平均湿度の時間分布

⑦起動停止回数

各アプリケーションの耐久時間内における起動停止回数は表 2.2.3-10 に示すとおり

表 2.2.3-10 起動停止回数

アプリケーション	起動停止回数	走行パターン
25トンクラストラック	100,000 回	WHVC
44トンクラストラック	100,000 回	WHVC
内航貨物船	500 回	表 2.2.3-4 耐久走行パターン
沿岸旅客船	4,000 回	表 2.2.3-4 耐久走行パターン
鉄道 2 両編成	6,350 回	表 2.2.3-5 耐久走行パターン
油圧ショベル 20 トンクラス	2,500 回	表 2.2.3-6 耐久走行パターン
油圧ショベル 13 トンクラス	2,500 回	表 2.2.3-6 耐久走行パターン
農業用トラクタ 50kW クラス	2,500 回	表 2.2.3-7 耐久走行パターン

2.2.4 2040 年目標

(1) 2040 年頃の目標設定の考え方

2030 年頃の IV 目標設定では、25 トンクラス大型トラックの製品要件を代表点として I-V 特性目標を導出した。しかし 2.2.2 節の今後の課題で述べた通り、大型トラックで欠かすことのできな

い 300kW 以上のエンジン搭載車種の駆動源を FC で置き換えるには課題があった。2040 年頃の目標では、現在ディーゼルエンジンでカバーされている大型トラック全般の FC 化を、駆動ユニットの FC 置き換えにより可能とすることをゴールとして I-V 特性目標を導出する。

(2) 計算前提

表 2.2.4-1 に計算前提を示す。2040 年頃の目標では、現行大型トラックのディーゼルエンジンを、搭載スペースの大幅な拡張なく FC で置き換え可能とすることを目標設定の大前提とした。具体的には、2030 年頃の前提に対し、FC スタック数は 44 トントラックまでを包含する全てのクラスで 2 基とし、FC 定常出力とシステム最大出力をエンジン出力同等とした。これにより 2030 年頃に対して I-V 特性と出力密度のレベルアップが想定される。

一方、FC システム・車両側の性能向上を考慮することで I-V 特性への過大な目標割り付けとなることを回避する。具体的には、ラジエータは現行のエンジン冷却用ラジエータと同等のサイズとすることを求めつつも、FC 最大水温増加等による冷却能力向上を見込んだ。同様に、車両の空力改善による走行抵抗低減や FC システムの各種補機の消費電力低減、補機小型化やレイアウト改善（想定）によるセル面積向上を盛り込んだ。

また、I-V 特性の BOL 目標値導出において重要となるのが、I-V 特性の劣化特性の前提である。2040 年目標設定では、既定のストレス入力に対する触媒溶出・析出速度の現行値（Gen2 MIRAI 同等）を 1 とした場合の比率でケーススタディを行った。

表 2.2.4-1 ケーススタディの前提条件

項目		2040年頃の目標値	参考：2030年頃の目標値 HDT他、各種アプリ要件から	
車両		44トントラック	25トントラック	44トントラック
製品目標	耐久時間	5万時間	←	
	航続距離	1000km以上	-	
出力	FC定常出力 [kW] ※走行抵抗を現行値とした場合	350	200	300
	システム最大出力 [kW] ※走行抵抗を現行値とした場合	450	300	400
車両・システム	走行抵抗（空気抵抗Cd）	現行値（非公開）～10%低減	現行値（非公開）	
	FCスタック数 [基]	2	2	4
	セル枚数 [枚]	330	←	
	セル面積 [cm ²]	273, 293	273	
	2次電池容量 [kWh]	90	←	
	ラジエータ放熱量 [kW]	210, 220, 263※最大水温120°C前提	210	336
	FC最大水温[°C]	105, 120	105	
	FC補機消費電力 ※Gen2を100%とした場合の比率	ACP:93%, WP:90%, HP:0%, FDC:80%, RadFan:80%	各100%	
耐久要件	耐久走行パターン	WHVC + 始動停止(1回/cycle)	←	
	動力性能要件（耐久走行後）	350kW定常発電可能	200kW定常	300kW定常
触媒耐久前提	触媒溶出・析出速度 ※Gen2を1とした場合の比率	1, 1/30	1	



図 2.2.4-1 FC の各種補機

(3) 計算方法

2030 年頃目標の導出と同様に、EOL の I-V 特性で動力性能要件を満たすことを第 1 の要件として、さらに耐久走行による性能低下分（性能劣化）を耐久時間相当分の劣化シミュレーションで見込んだ時に必要となる BOL での I-V 特性を求めた。

(4) ギャップ把握とケーススタディ

①2040 年目標のギャップ把握

まず、2030 年頃の目標に対する 2040 年頃の目標のギャップを把握するため、FC システム・車両側の性能向上がない場合を仮定して 2040 年頃の目標達成に必要な I-V 特性を求め、図 2.2.4-2 に示した。図 2.2.4-3 にはその根拠となる EOL での FC 発熱量を示す。2030 年頃の目標の状態では定常出力要求値 350kW での EOL における発熱量は 380kW となり、ラジエータ冷却能力の目標値 210kW に対して大きなギャップが存在することが分かる。これに対し、冷却能力 210kW で 350kW を定常出力可能とするためには、図 2.2.4-2 に示されるようにセル電圧を 2.5A/cm² で 0.3V 向上させる必要がある。後（図 2.2.4-5）に示されるが、この電圧ギャップは触媒活性向上比率に直すと数千倍以上もの値となり実現可能性が懸念される。（2040 年 WG との意見交換により、触媒活性向上率の限界値は 100 倍以内を想定）

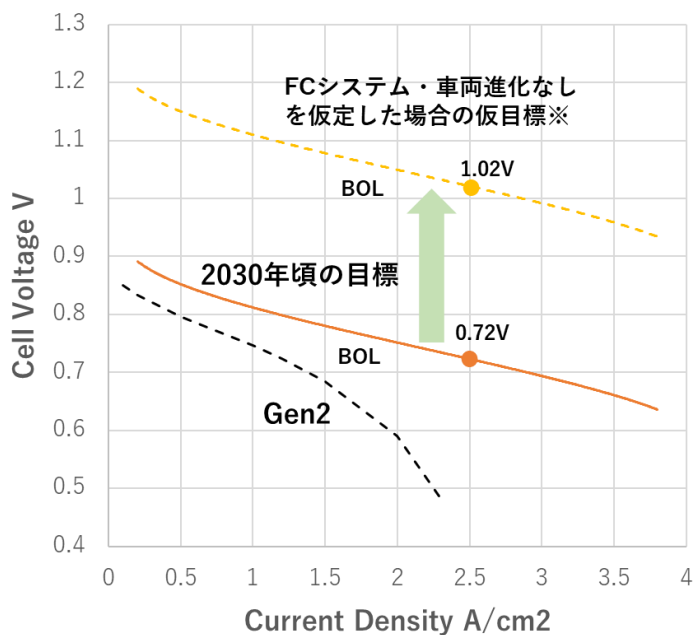


図 2.2.4-2 FC システム・車両進化なしの場合の 2040 仮目標※と 2030 年頃目標のギャップ

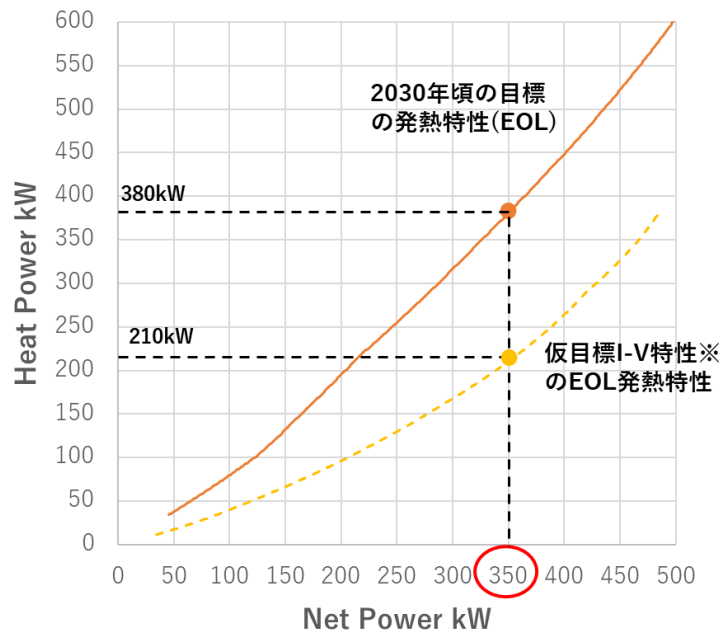


図 2.2.4-3 図 2.2.4-2 の I-V 特性に対応する EOL-IV での発熱量 (FC 最大水温 105°C)

②目標到達へのシナリオ選定

次に、FC システム・車両の各性能向上を想定したケース毎に、2040 年頃の目標の実現に必要な I-V 特性と触媒活性向上率を解析することにより、実現可能なシナリオ構築に向けたケーススタディを行った。図 2.2.4-4 に各性能向上を想定したケースに対する必要 I-V 特性の推移を、 $2.5\text{A}/\text{cm}^2$ における電圧要求値で示す。電圧要求値の変化幅から、FC 冷却水温高温化(最大 120°C)と耐久向上(触媒溶出・析出速度 1/30 相当)による I-V 特性低減効果が大きいことが分かる。図 2.2.4-5 には、各ケースに対応する触媒活性向上率を示す。触媒活性向上率を 100 倍以内に留めるためには、これらの冷却水温高温化と耐久向上に加えて FC システム・車両の各種性能向上が必要であることが明らかとなった。この結果を基に、材料研究者との協議(2040 年シナリオ WG)を経て冷却水高温化を含めた前提による 2040 年頃の目標 I-V 特性を選定した。

表 2.2.4-2 目標 I-V 設定の前提条件

項目		2040年頃の目標I-V特性の試算前提
車両・システム	走行抵抗（空気抵抗Cd）	現行の10%低減
	FCスタック数 [基]	2
	セル枚数 [枚]	330
	セル面積 [cm ²]	293
	2次電池容量 [kWh]	90
	ラジエータ最大放熱量 [kW]	263 ※最大水温120°C, 外気温45°C
	FC最大水温[°C]	120
	FC補機消費電力 ※Gen2を100%とした場合の比率	ACP:93%, WP:90%, HP:0%,FDC:80%, RadFan:80%
触媒耐久性能	触媒溶出・析出速度 ※Gen2を1とした場合の比率	1/30倍

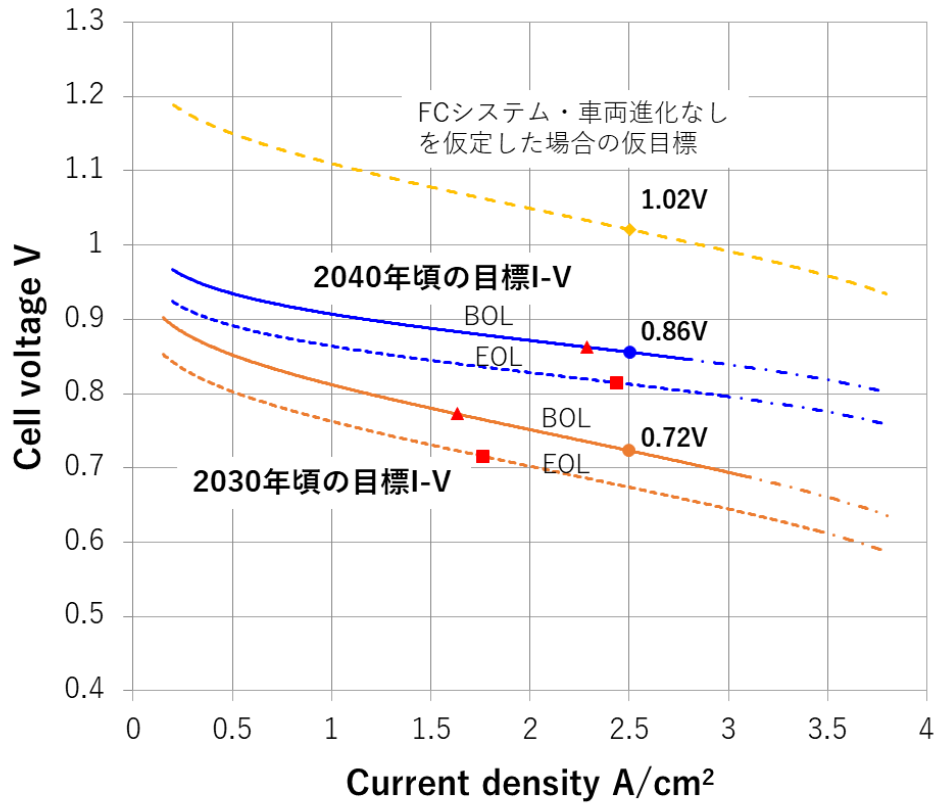


図 2.2.4-6 2040 年頃の目標 I-V 特性

※1 BOL (Beginning of Life: 初期性能)、EOL (End of Life: 耐久後性能)、耐久パターン: WHVC+始動停止(1 回/cycle)

※2 2030 年頃の目標 I-V(Pt 量 0.19g/kW 前提): ▲: 電流密度 1.63A/cm²、電圧 0.77V、■: 電流密度 1.76A/cm²、電圧 0.72V

※3 2040 年頃の目標 I-V(Pt 量 0.07g/kW 前提): ▲: 電流密度 2.29A/cm²、電圧 0.86V、■: 電流密度 2.44A/cm²、電圧 0.81V

※4 I-V 特性上の実線もしくは点線で示されている範囲は 44 トン HDT での使用範囲を表す。それ以外の一点鎖線の範囲は、乗用車を含めた他のアプリケーションで使われる可能性もある。

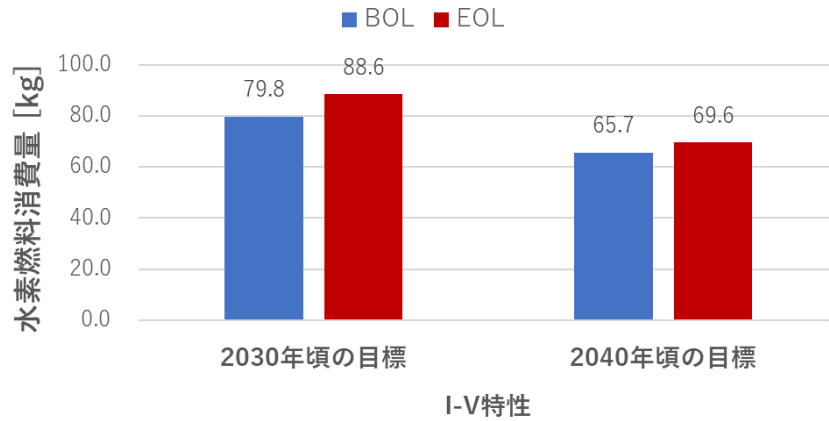


図 2.2.4-7 目標 I-V 特性の燃費（1000km 走行に必要な燃料消費量@44 トン、WHVC）

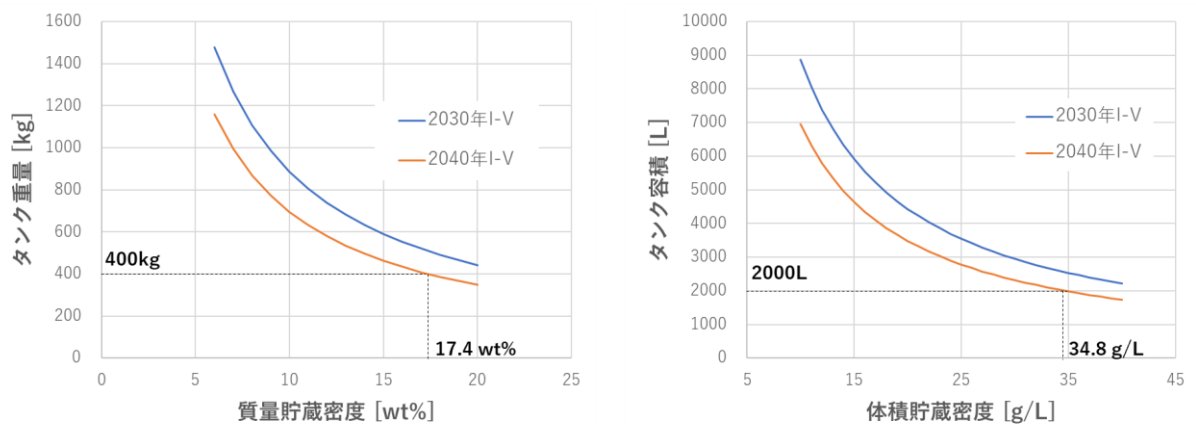


図 2.2.4-8 航続距離 1000km に必要な水素タンク質量と容積

図 2.2.4-7 に 2030 年頃と 2040 年頃の目標 I-V 特性による燃費（1000km 走行に必要な燃料消費量@WHVC）を示す。約 20%の燃費削減が見込まれ、これにより平均車速 80km/h で 5 万時間走行した場合、総燃料消費量に直すと HDT1 台当たり約 66 トン分の水素消費量削減となる。

また、2040 年頃の目標 I-V 特性による燃費から、1,000km 走行に必要な水素タンクの質量および体積を求め、図 2.2.4-8 に示した。ここでは水素貯蔵システムの性能指標である質量貯蔵密度および体積質量密度を現状相当から将来値を想定し、質量と体積を求めている。

2.3 FCシステムとしての技術目標

2.3.1 コスト

DOE が試算した 2030 年の HDV コスト目標[1]を参考にして、2030 年頃の FC システム目標 0.9 万円/kW、FC スタックコスト 0.45 万円/kW（年産 10 万台前提）を提案する。ただし、FC システムのコストについてはスタックと水素、エア供給系および冷却系システムの BOP を対象とし、水素貯蔵システム、2 次電池、DC/DC コンバータ等のパワーエレクトロニクス、モータを含まない。DOE のコストの考え方は、現在の class8（米国における車両総重量 15 トン以上）の大型トラックを対象として、ディーゼルエンジン（排ガス処理装置を含む）のコスト 2.5 万ドルと等価の FC システムコスト 60 ドル/kW（出力 390kW）を最終目標とし、図 2.3.1-1 に示すコスト低減シナリオと表 2.3.1-1 に示す前提条件[2]に沿って、現在から技術進展で達成し得る 80 ドル/kW を 2030 年目標と設定している。

一方、HDV のコストを考える上で、乗用車が車両価格、燃費、消費者の嗜好性、利便性、環境意識などの幅広い基準で選択されることに対して、商用車では顧客（事業者）の事業の経済性の成立が最優先であり、車両の総保有コスト（TCO：Total Cost of Ownership）の考え方が重要となる。TCO は車両購入費と運用費（燃料費、メンテナンス費、高速道路料金、等）の合計であり、現状ではディーゼル車両と比べて車両価格・燃料費は高い。2030 年頃においても、FC システムコストがディーゼルエンジンと等価のレベルではなく、さらに水素貯蔵システム、2 次電池、他の電動化に必要な車両改造のコストも想定すると現行のディーゼル車両価格との差がある。

図 2.3.1-2 に大型 FC トラックにおける TCO 低減の考え方を示す。ディーゼル燃料に対する水素のパリティコストは約 540 円/kg-H₂（大型ディーゼルトラックの平均燃費 4km、2022 年の軽油平均店頭価格 150 円/L、FC トラックの平均燃費は表 2.1.8-4 の 14.4km/kg-H₂を前提）であり、現状の 1,100 円/kg-H₂に対して高価であるが、将来的に水素供給価格がパリティコストを下回るようになれば、FC パワートレイン化による車両価格の差額をカバーできるようになる（試算例として、大型トラックの生涯走行距離 150 万 km とすると、水素供給価格がパリティコストから 100 円/kg-H₂下がれば約 1,000 万円分の TCO を圧縮）。したがって、将来は、水素供給価格の低減を想定しつつ、更なる FC・水素貯蔵システムのコスト低減、システム効率向上による燃費改善などを進めていくことによって TCO でのパリティの早期成立を目指すことが重要である。

HDV 用 FC スタックを構成する主要材料のコストに関しても、DOE のコスト内訳比率を参考にして提案する。詳細は 2.5 節の 2.5.5 項で解説するが、例えば、Pt 使用量は、DOE コスト試算では 0.326g/kW であるが、今回、我々が議論したところでは国内 2030 年頃の目標として約 0.2g/kW を提案した。このため、スタックコストのうち大部分を占める触媒層のコスト低減代があるが、高活性触媒や触媒利用率向上に対するメソポーラスカーボン（MPC）担体、高酸素透過アイオノマの採用などによるコスト上昇を想定して、DOE と同等レベルのコスト目標設定を提案している。電解質膜、GDL、セパレータ、ガスカートについては耐久性を確保するため FCV と比べて相対的に高いコストが想定される。2040 年のコスト目標についても検討を実施し今後追加する。

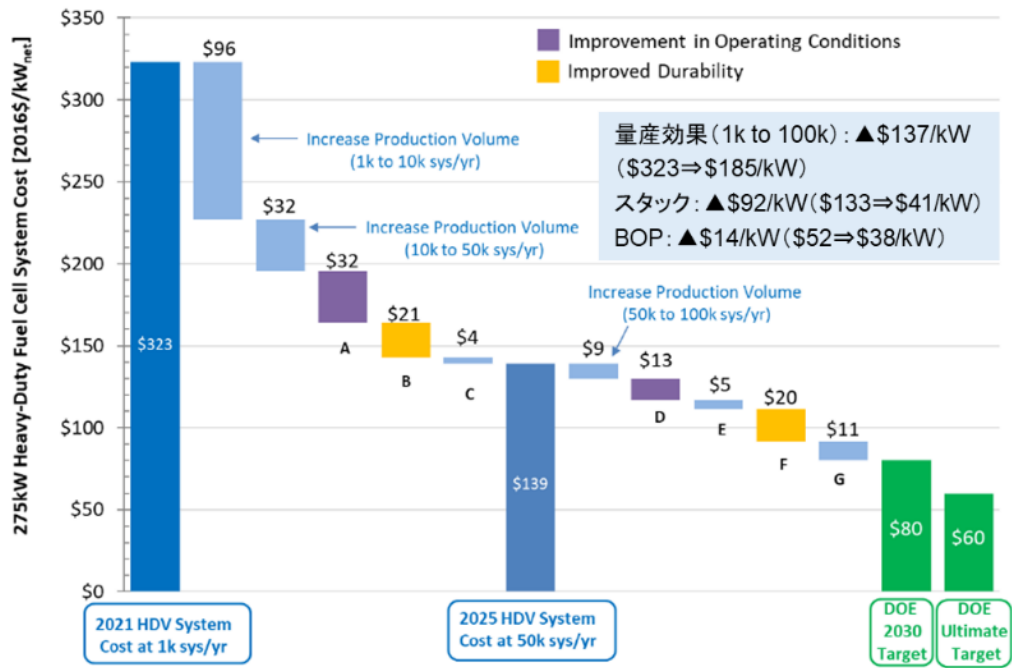


図 2.3.1-1 DOE のコスト低減シナリオ
(class-8 の 275kW システムを前提)

表 2.3.1-1 DOE のコスト低減シナリオの前提条件

シナリオ	技術進展の内容	コスト低減代(\$/kW)	
		スタック	BOP
A	出力密度: 440 から 553mW/cm ² へ向上、EOL 電圧: 0.7 から 0.66V、冷却温度: 88°C から 94°C、Pt 目付量: 0.4 から 0.35mg/cm ² へ低減	32	-
B	オーバーサイジング低減(出力密度: 553 から 644mW/cm ² へ向上)、CVM のセンサーあたりのセル数増(4 から 8)、BOP 交換コストを 30% から 15% に削減	15	6
C	電解質膜: e-PTFE から代替の低コスト膜補強材料へ変更、膜厚を 20μm から 15μm に低減	4	-
D	出力密度: 644 から 708mW/cm ² へ向上、Pt 目付量: 0.35 から 0.3mg/cm ² へ低減	13	-
E	エア系: モーター・コントローラ効率を 85% から 92%、コンプレッサ効率を 72.5% から 75%、エキスパンダ効率を 72% から 75% へ向上	-	5
F	オーバーサイジング低減(出力密度: 708 から 921mW/cm ² へ向上)、BOP 交換コストを 15% から 8% に削減、不測のコスト(Contingency) を 10% から 5% に削減	17	3
G	スタック数を 4 から 2	11	-
合計		92	14

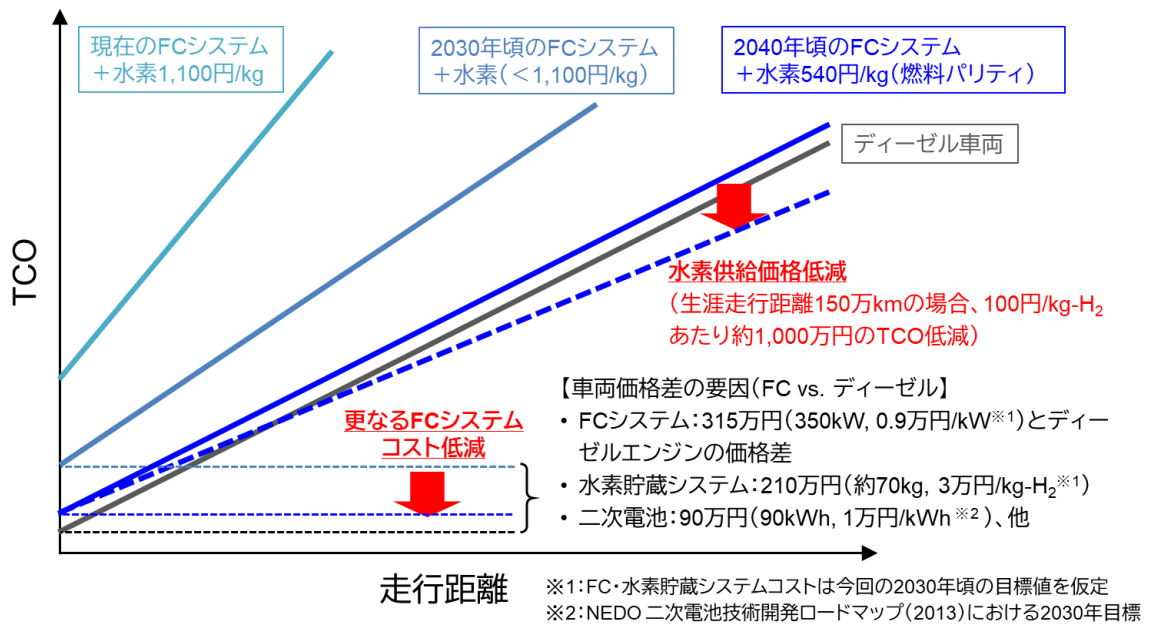


図 2.3.1-2 大型 FC トラックにおける TCO 低減の考え方

(参考文献)

- [1] “Hydrogen Class 8 Long Haul Truck Targets”, DOE Hydrogen and Fuel Cells Program Record #19006
- [2] B. D. James, “Fuel Cell Systems Analysis”, 2021 DOE Hydrogen and Fuel Cells Program Review Presentation

2.3.2 FC 体積出力密度

今回の検討を基に FC システム、FC スタックそれぞれの体積出力密度を算出した。算出の前提として出力を以下の表 2.3.2-1 のとおり定義した。

表 2.3.2-1 体積出力密度算出の定義

FC システム出力	FC システムの出力(Net 出力) ※2 次電池は含まない
FC スタック出力	FC スタック単独の出力(Gross 出力) ※FC システムから補機損を除いた値
FC システム体積出力密度	FC システム出力/FC システム搭載スペースで算出 搭載スペースはモータ、インバータを除く値
FC スタック体積出力密度	FC スタック出力/FC スタック体積

大型トラックの場合の定格出力は熱定格動作点の値を代表とし、建機の場合は連続掘削の平均値とした。特に記載のないアプリケーションに関しては定格出力が最大出力となっている。

ここでは FC スタックの体積については各アプリの許容 FC システムスペースに係数(トヨタ FC モジュール横型の FC スタック体積[1]/FC システム体積[2]の比率と仮定)を掛けて算出した。鉄道のみ実際の許容 FC スタック体積を記載している。

ここで、表 2.3.2-2 と表 2.3.2-3 は 44 トンクラスの大型トラックのみ 2040 年頃の FC システム前提から算出しており、その他のアプリケーションに関しては 2030 年頃の FC システム前提

から算出した。

これらの結果、2030年頃のFCシステムの体積出力密度は最大出力ベースの場合は25トンクラス大型トラックが0.60kW/L、定格出力ベースの場合は農業用トラクタ50kWクラスが0.41kW/Lと最も大きな値となった。また、FCスタックの体積出力密度は定格出力ベースの場合、農業用トラクタ50kWクラスが6.76kW/Lと最も大きな値となった。一方、2040年頃のFCシステムの体積出力密度は44トンクラス大型トラックで最大出力ベースの場合は0.80kW/L、定格出力ベースの場合は0.70kW/Lとなった。また、FCスタックの体積出力密度は定格出力ベースの場合、10.38kW/Lとなった。

スタック出力密度達成のためにはI-V特性の向上だけでなくセル厚みの低減、シールやマニホールド面積の低減に向けた開発も必要になる。また、本検討の結果から最大電流密度（最大電流）はEOLで3.44A/cm²（939A）となっており、補機部品に関しても本電流密度に対応する設計が必要となる。ただし、目標となる体積出力密度は搭載設計の前提によって大きく異なること、最大出力はFCと2次電池のバランスや制御方法により左右されること、補機とスタックの体積配分などこれらの値は仮定を含んでいるため今回は暫定値とし、乗用車の目標値も踏まえて来年度以降更新を実施する。

（参考文献）

[1] 高橋剛ほか, “新型MIRAIの第2世代FCシステム概要”, TOYOTA Technical Review Vol. 66 Feb. 2021, p.12-15 (2021)

[2] <https://global.toyota.jp/newsroom/corporate/34799387.html>

表 2.3.2-2 FCシステムの体積出力密度

アプリケーション	FCシステム 体積 [L]	FCシステム 最大出力 [kW]	FCシステム 定格出力 [kW]	FCシステム 体積出力密度 ^{※1} 最大出力ベース [kW/L]	FCシステム 体積出力密度 ^{※1} 定格出力ベース [kW/L]
25トンクラス大型トラック	502	303	187 ^{※2}	0.60	0.37 ^{※2}
44トンクラス大型トラック	502	400	350 ^{※2}	0.80	0.70 ^{※2}
内航貨物船	18,000	600	600	0.03	0.03
沿岸旅客船	7,000	480	480	0.07	0.07
鉄道2両編成	1,300	400	400	0.30	0.30
油圧ショベル 20トンクラス	1,300	120	101	0.09	0.08
油圧ショベル 13トンクラス	400	74	63	0.19	0.16
農業用トラクタ 50kWクラス	125	51.5	51.5	0.41	0.41

※1：体積出力密度＝FCシステム定格出力/FCシステム搭載スペースで算出、搭載スペースはモータ・インバータを除く値

※2：大型トラックの出力は熱定格動作点

表 2.3.2-3 FC スタックの体積出力密度と最大電流

アプリケーション	定格出力 [kW]	FC スタック 体積 ^{※1} [L]	体積出力密度 [kW/L]	EOL 最大電流密度 [A/cm ²]	EOL 最大電流 [A]
25トンクラス大型トラック	228 ^{※3}	36.72	6.21 ^{※3}	3.44	939
44トンクラス大型トラック	381 ^{※3}	36.72	10.38 ^{※3}	2.96	867
内航貨物船	723	1316.91	0.55	3.04	829
沿岸旅客船	578	512.13	1.13	3.30	900
鉄道 2 両編成	475	96.00	4.95	1.88	513
油圧ショベル 20トンクラス	120	95.11	1.26	1.97	537
油圧ショベル 13トンクラス	74	29.26	2.53	1.29	353
農業用トラクタ 50kW クラス	61.8	9.15	6.76	3.19	872

※3：大型トラックの出力は熱定格点

2.3.3 Pt 量（資源循環と将来目標@2050 年）

モビリティ用途で消費する Pt 量は、図 2.3.3-1 より 2000 年以降ほぼ 100 トン/年となっており、将来にわたってモビリティ用途で消費できる Pt 量は 100 トン/年と仮定する。因みに、モビリティ用途でリサイクルされる Pt 量は、図 2.3.3-1 より約 40%である。

モビリティ用途内の内訳は、表 2.3.3-1 より小型ガソリン車向け（乗用車・小型商用車・2 輪車など）が約 19%、小型ディーゼル車向け（乗用車・ピックアップトラック・小型商用車など）が約 65%、大型車向けが約 15%、自動車以外の移動機器向けが約 1%である。小型ガソリン車向けのカテゴリは将来 BEV への置き換えがメインと仮定すると今回の議論の対象である大型車が消費できる Pt 量は、小型ガソリン車向けと大型車向けの合計で将来に渡って 32 トン/年と仮定する。

大型車のグローバル生産台数は、図 2.3.3-2 より約 400 万台/年であり、この需要が、将来に渡って継続すると仮定する。将来の CN 社会（2050 年）において、大型車に占める FCV の販売比率は、図 2.3.3-3 より約 30%と予測されており、FC 大型車の販売台数は約 120 万台/年（2050 年）と予測される。

以上から、2050 年に FC 大型車 1 台当たりが消費できる Pt 量は約 26.5g/台（=32 トン÷120 万台）となる。FC 本格普及期までには、FC 大型車 1 台当たり Pt 使用量 26.5g 以下の低 Pt 技術確立を目指すべきである。また Pt リサイクル率を更に高める取組も大変重要となる。

ただし、2040 年頃の検討では小型ディーゼル車向けカテゴリの Pt は全て乗用車に使用される前提としたため、大型トラックの目標 Pt 量は厳しい値となる。よってこの目標 Pt 量は今後将来の乗用車の市場規模、HDV 向けの FC システムコスト目標の検討も鑑みて更新する。

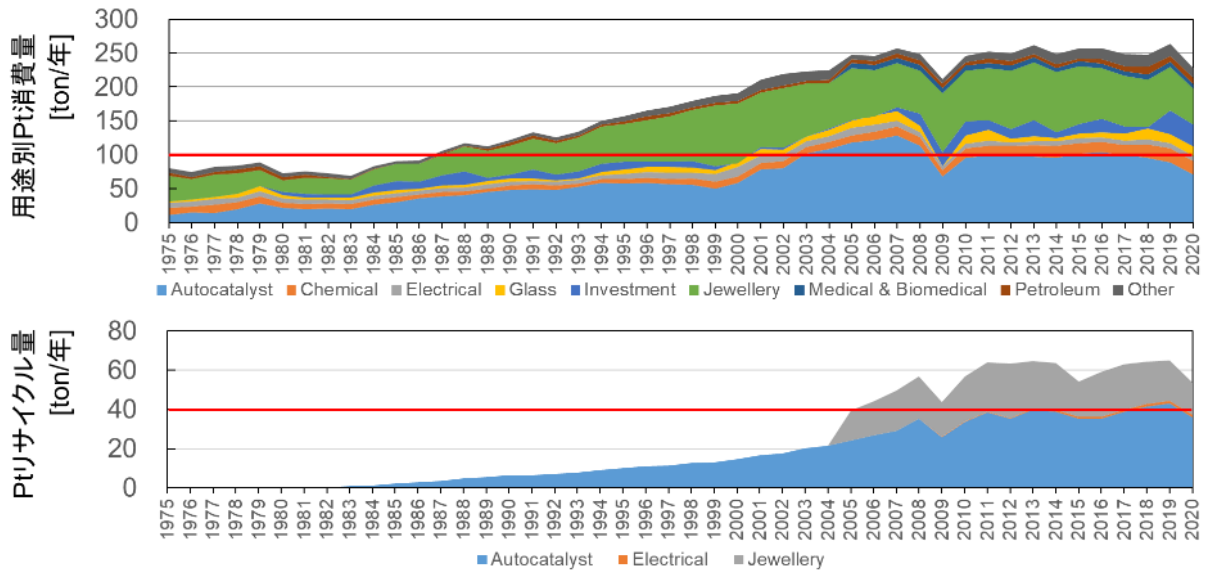


図 2.3.3-1 用途別 Pt 消費量とリサイクル量[1]

表 2.3.3-1 モビリティ向け Pt 需要の内訳[2]

車種	プラチナ需要:自動車触媒(単位:1,000 oz)		
	2010年	2011年	2012年
小型ガソリン車	640	545	620
小型ディーゼル車	2,025	2,105	2,020
大型車	400	490	500
自動車以外の移動機器	10	45	100

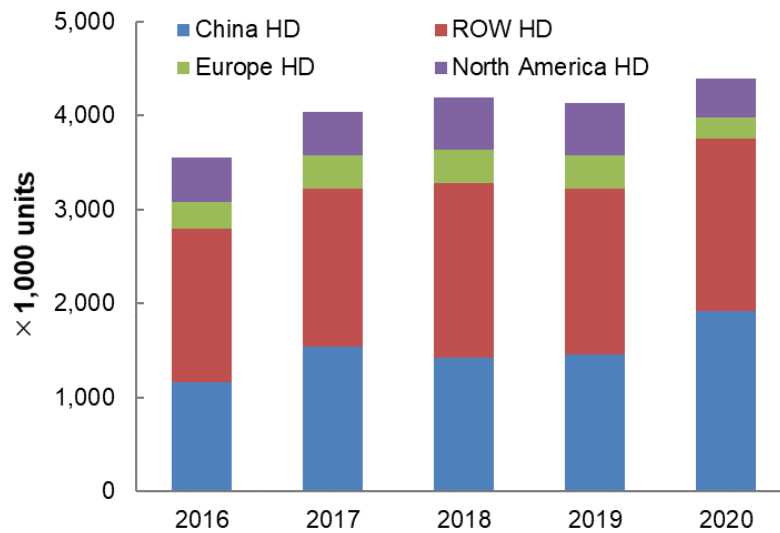


図 2.3.3-2 大型車のグローバル生産台数[3] (ROW : Rest of World の略)

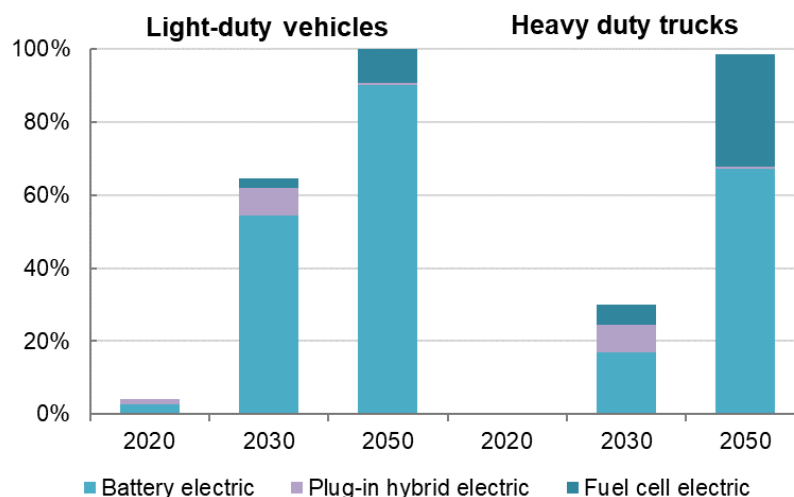


図 2.3.3-3 EV-PHEV-FCV の販売比率予測[4]

(参考文献)

[1] Johnson Matthey ホームページ

[2] Johnson Matthey ホームページより当社作成

[3] World Platinum Investment Council, https://platinuminvestment.com/files/884932/WPIC_Platinum_Perspectives_August_2021_JA.pdf より当社作成

[4] IEA, “Net Zero by 2050 - A Roadmap for the Global Energy Sector”より当社作成

2.3.4 CN 対応に向けた水素 FC 以外の取り組み状況

CN の実現に向けては様々な技術が提案・発案され開発が進められている。単独の技術・対応だけでは CN 実現は難しく、多くの技術をバランスよく開発していくことが重要と言われている。そのような状況で水素 FC が CN の対応で貢献していくためには、水素 FC が期待される製品・アプリケーションで同様に活用が期待されている他の技術の開発状況も常に把握して進むべき方向を配慮する必要がある。ここでは代表的な技術として水素エンジン・e-Fuel・2次電池（バッテリー）について考察を加え水素 FC の目指すべき開発について言及する。

(1) 水素エンジン

水素を活用するという事では FC 同様に大変期待できる技術である。また多くの製品・商用アプリケーションではエンジンが現在は使われているので適用が容易なことや内燃機関の既存サプライチェーンの活用などの優位性も多くある。近年、燃焼効率の改良も著しく高負荷域では FC の効率と肉薄している。一方で、排気対応や生成水のオイル混濁など製品化・普及に向けては解決しなければならない課題が FC 同様に多くある。また、効率以外にも表 2.3.4-1 に示すような指標があり、●がある項目では FC システムの改良が必要な項目であり開発が必要である。

表 2.3.4-1 水素エンジンを参考にした FC で更なる開発を推進したい項目

ZEV		冷却性	●	メンテナンス	
効率	●	耐久性(性能低下)	●	ドライバビリティ	
燃費(含むトンキロ燃費)	●	燃料性状耐性	●	回生力	●
コスト・TCO	●	搭載(システム体積)	●	騒音	

(2) e-Fuel

水素エンジン同様に既存のシステムへの適用の容易さや燃料の搭載課題で e-Fuel に対する期待は大変大きい。ただし CN ではあるがゼロエミッションではないことや、燃料価格の課題で使用を限定する動きもある。効率の比較では水素エンジン同様に FC の効率も向上させる必要があると言える。

(3) 2次電池 (バッテリー)

FC と 2次電池 (バッテリー) はエネルギー密度とコストとエネルギー補給の 3 点で比較されることが多い。バッテリーパックの体積エネルギー密度の向上が進んでいる。製品に近いレベルで 200 ~300Wh/L というような意欲的な数値が公表されている (Tesla、CATL、ONE)。70MPa の高圧水素のタンク込みの体積エネルギー密度は 800Wh/L 程度である。FC システムの効率や FC システムの体積を含めた体積を考慮するとかなり拮抗した状況になっている。FC システムの効率向上や軽量コンパクト化は重要な開発要素である。

各パワートレインの比較のため 2040 年頃の水素エンジンや 2次電池 (バッテリー) の効率やエネルギー密度の進化を想定し、FC、水素エンジン、2次電池それぞれの大型トラックのトンキロ燃費 (電費) の比較を行った。ここでトンキロ燃費 (電費) とは燃費に積載可能な重量を掛けた数値であり、商用トラックで一般的に使われる性能指標である。2040 年頃の FC システム目標が達成できれば FC は水素エンジンと比較して燃費が良いこと、バッテリーと比較して質量密度が高い (積載可能な重量が大きくなる) ことから FC の優位性を確認した。

2.4 水素貯蔵システムとしての技術目標

2.4.1 高圧水素貯蔵

CFRP（炭素繊維強化プラスチック）製高圧タンクのコスト低減のため、その構成材料である炭素繊維やエポキシ樹脂等の材料価格自体と、それらの使用量を削減することに取り組まれている。

従来構造の CFRP 製高圧タンクは、フィラメントワインディング（FW）工法で製造されており、連続した炭素繊維から構成されている。このため、必ずしも全体が力学的に最適に繊維配置されているわけではなく、強度に余裕がある部分が存在することが知られている。図 2.4.1-1 にその概略を示す。

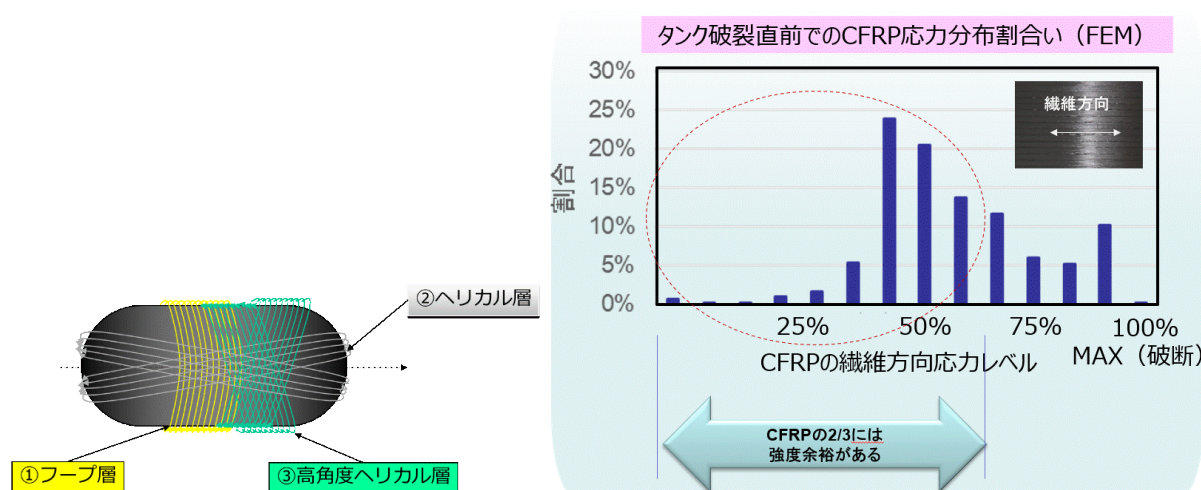


図 2.4.1-1 CFRP 製高圧タンクの積層と応力分布割合
(第 2 回 FC-Cubic オープンシンポジウム資料より)

上記から、従来構造の最適化と、革新構造の採用による炭素繊維の最適配置により構成材料の使用量を削減するための検討が進められており、コスト低減と質量貯蔵密度の低減に寄与する。2040 年に向けては、炭素繊維自体の使用量低減やその他構成材料の使用量低減のシナリオとその試算値を図 2.4.1-2 に示す。

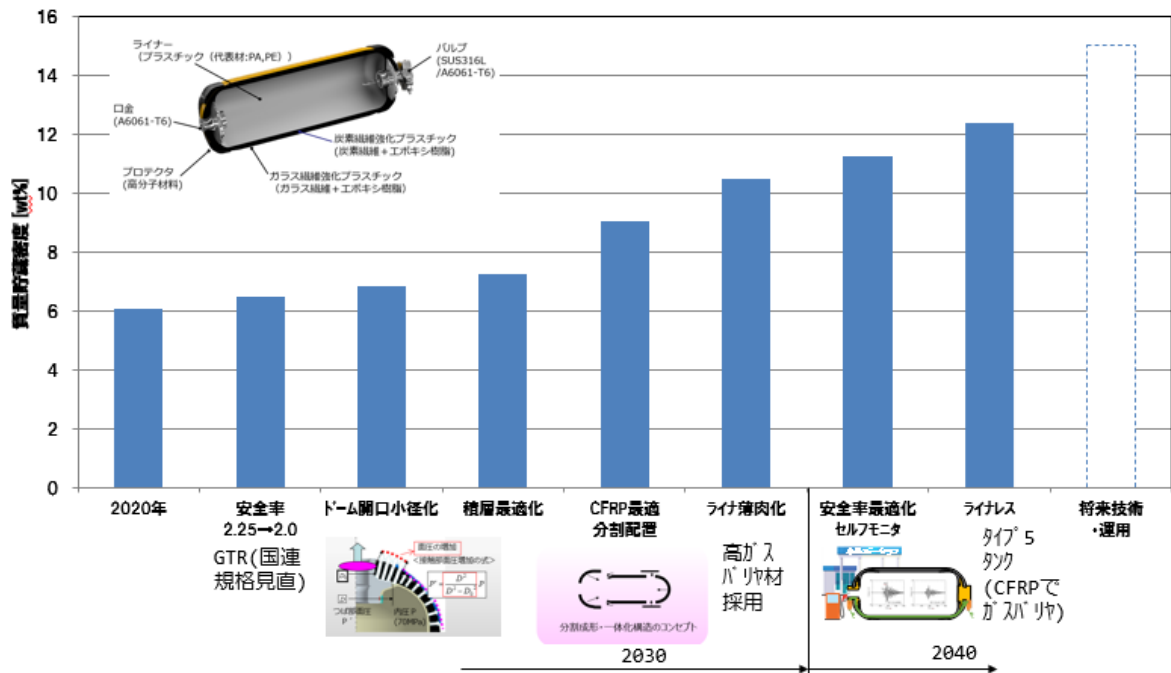


図 2.4.1-2 使用材料の削減シナリオと質量貯蔵密度の関係 (試算)

2020年目標を基準にして、左側3項目は従来フィラメントワインディング構造での使用材料削減シナリオの例である。

- 既に議論が進んでいる、GTR13 Phase2にて高圧タンクの破裂安全率が2.25→2.0へ引き下げられようとしていることの取り込み。
- タンクドーム部の口金による開口部を小径化することによるヘリカル層の削減、また、製造ばらつき要因の解明とそれによる積層の最適化を目指す。
- 更なる削減の方向性として、強度に余裕のある、主にタンク胴体部のヘリカル層を削減することに着目した、CFRP最適配置のための分割構造化により、合計約40%の削減を目指すことを想定した。
- 更に、高バリア性ライナー材料の採用によりライナー厚みの半減。
- 2040年に向けて、非破壊検査技術を発展させたセルフモニタを活用し安全率の更なる低減（これに向け、最適安全率の検討も必要であると考え）と、ガスバリア性能をCFRP層に付与する等のライナレス、又はライナーの極薄化開発を目指す。
- 今後、DXなど将来技術を活用し、開発・製造・運用を通じての更なる低減方向性を探索していく必要。

ここに示した質量低減手段により、炭素繊維が削減されるためCFRP製タンクの体積が低減される。図2.4.1-3に体積貯蔵密度の低減代の試算値を示す。

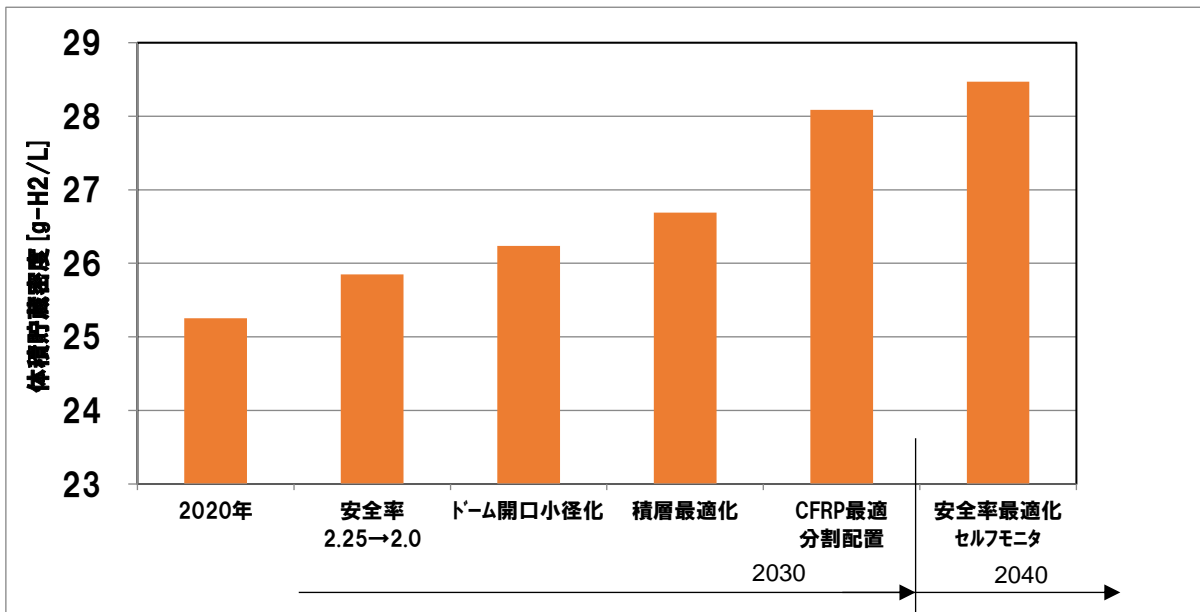


図 2.4.1-3 使用材料の削減シナリオと体積質量密度の関係（試算）

これらの考察から、表 2.4.1-1 のように 2030 年、2040 年の高圧水素貯蔵目標を設定した。2040 年目標は、超高強度の FRP 用繊維や IoT、DX 技術を活用した検査技術とそれによる貯蔵容器の安全率等規制緩和などもあわせて目指すレベルのものである。

表 2.4.1-1 水素貯蔵目標

貯蔵方式	2030 年頃の目標		2040 年頃の目標	
	質量貯蔵密度	体積貯蔵密度	質量貯蔵密度	体積貯蔵密度
	wt%	g/L	wt%	g/L
高圧水素貯蔵 ※2	10	28	15 以上※1	29 以上※1

質量貯蔵密度＝搭載水素質量 (kg) / 貯蔵容器質量 (kg) × 100

体積貯蔵密度＝搭載水素量 (g) / 貯蔵容器体積 (L)

※1 超高強度の FRP 用繊維、IoT、DX 技術を活用した検査技術とそれによる貯蔵容器の安全率等規制緩和などもあわせて目指す想定

※2 目標の前提は L/D ≧ 5 の容器とする

なお、上記の目標は海外の目標と比較しても十分に競争力があり、且つチャレンジャブルな目標である。表 2.4.1-2 に各国の目標を示す。

表 2.4.1-2 各国の水素貯蔵開発目標

	米国(DOE)※1		欧州(CHJU)※2	
	2020	Ultimate	2020	2030※3
質量貯蔵密度(%)	5.5	7.5	5.3	6
体積貯蔵密度(g/L)	40	70	30	35
コスト¥ \$ €/kg H ₂	\$333	\$226	€500	€300

※1 : <https://www.energy.gov/eere/fuelcells/physical-hydrogen-storage>

※2 : FCH 2 JU - MAWP Key Performance Indicators (KPIs)

※3 : 2040年目標は規定されていない

2.4.2 液体水素貯蔵

高圧水素貯蔵で不足する水素量に対し、連続的に長距離、又は長時間運用する用途への解決策候補の一つとして、液体水素貯蔵が期待されている。

液体水素の沸点は-253℃であるため外部からの入熱による水素の蒸発・圧力上昇を回避するためのBOG（ボイルオフガス）や、充填時のオフガス量の低減などの技術課題が従来から認識されている。

しかしながら国内では、大型の水素輸送を対象にした技術開発は世界トップレベルで進んでいるものの、移動体の燃料装置としての液体水素貯蔵技術検討は注目度が低い状況である。

一方海外では、2022年6月にダイムラートラック社が液体水素で燃料電池トラックの走行テストや充填テストを開始したとの発表があった。また、ISOで液体水素容器や充填に関する技術規格の議論を始めることが決定された。

液体水素技術の質量貯蔵密度については、既存（2017年発行）のNEDO技術ロードマップに、2025年開発目標として液体水素個別に17wt%、体積貯蔵密度は全体目標として50g/Lが示されている。米国DOEにて、システムの質量貯蔵密度15wt%、体積貯蔵密度30g/Lを目標とした液体水素プロジェクト（Project ID: ST223）が実施されており、目標を過達との報告がある。これから、NEDOが2017年に設定した目標と類似の性能を米国や欧州では実証を始めているフェーズであるとうかがえる。

また、今期のロードマップ検討の中から乗用車、トラック以外の産業用途に使用現場への水素供給が燃料電池の用途拡大の前提であることも分かってきた。建設現場や農地などへ水素を供給するため、大量の水素を運搬、高圧ガスとして供給する技術を小・中型トラックのサイズで実現する開発は、燃料装置用液体水素貯蔵システムの技術開発と共通する部分が多いと考えられる。

今期、移動体の燃料装置としての液体水素貯蔵技術に関する調査、議論が十分できなかったため次期に議論を継続し、世界に伍することができる技術目標と開発項目を検討する。

2.4.3 水素貯蔵材料

高圧水素貯蔵や液体水素貯蔵では実現困難な体積貯蔵密度向上による貯蔵容器の小型化を目指していく（図 2.4.3-1）。貯蔵密度は、CO₂ を排出しないカーボンフリーな燃料である液化アンモニアと同等レベルとなる「(容器ベースで) 80g-H₂/kg 以上かつ 70g-H₂/L 以上」を 2050 年仮目標とする。更に貯蔵圧力は究極的には「1MPa 以下」を目指すことで、容器コスト低減や容器形状自由度向上、更には水素供給コスト低減にも貢献していく。その中間マイルストーンとして、「2050 年仮目標の達成率 60%」を 2040 年仮目標とする。貯蔵密度以外に「(仮) タンク内部の上下限温度範囲内（-40℃～85℃）で、速やかに水素吸放出できること」、「(仮) 11,000 サイクル後の貯蔵能力低下は 10%以下のこと」なども実装段階では要件となる。上記仮目標の妥当性については、2023 年度以降も継続的に検討していく。

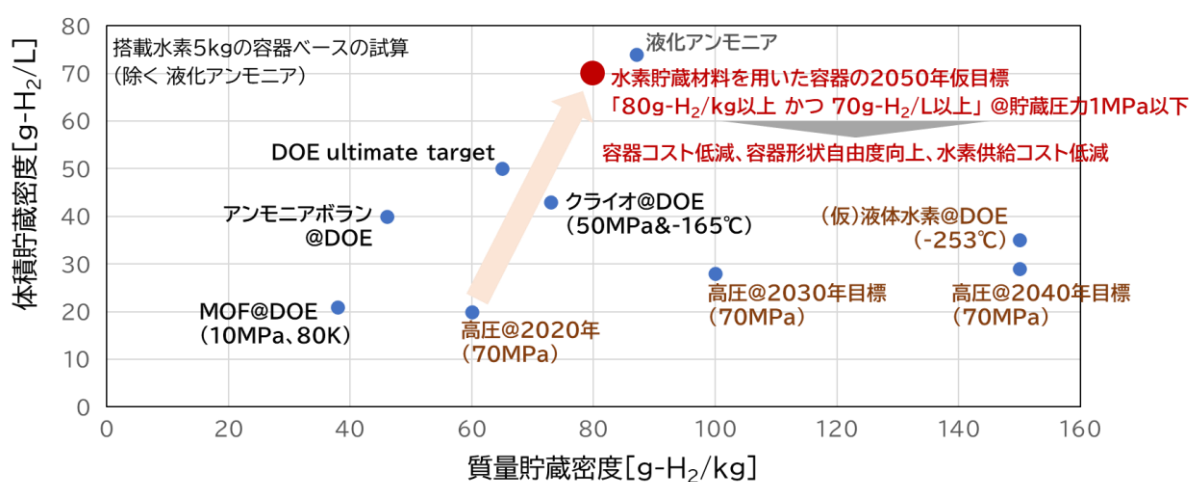


図 2.4.3-1 各技術の水素貯蔵密度

材料研究者の検討の一助とするため、上記仮目標（容器ベース）を貯蔵材料単体の仮目標にブレイクダウンする。表 2.4.3-1 に比較対象となる液化アンモニア容器とその貯蔵密度を示す。液化アンモニア容器の仕様は<高圧ガス容器のご案内 (kobelco-gascylinder.co.jp)>を参照した。

表 2.4.3-1 液化アンモニア容器仕様と貯蔵密度

液化アンモニア容器仕様と貯蔵密度		詳細内容
容器の内容積	930L	
容器の外容積	1,188L	= $1/4 \times 79.4\text{cm}^2 \times \pi \times 240\text{cm} / 1,000$
容器内のガス量	500kg	
容器内の水素量	88kg	= $500\text{kg} \times 3/17$ (3H/NH ₃)
容器質量	505kg	
容器耐圧	3.6MPa	
容器材質	SM5208	
質量貯蔵密度	87g-H ₂ /kg	= $88 / (500 + 505)$
体積貯蔵密度	74g-H ₂ /L	= $88 / 1188$

次に上記容器を用いて、2050 年仮目標「80g-H₂/kg かつ 70g-H₂/L」の達成に求められる貯蔵材料単体の仮目標を表 2.4.3-2（材料充填率 50%の場合）と表 2.4.3-3（材料充填率 80%の場合）に示す。貯蔵材料単体の仮目標は「186kg-H₂/kg かつ 115～184g-H₂/L（材料充填率 80%～50%の場合）」となる。

表 2.4.3-2 2050 年仮目標達成に求められる貯蔵材料単体の仮目標（材料充填率 50%の場合）

容器仕様と貯蔵密度		詳細内容
容器の内容積	930L	
容器の外容積	1,188L	= $1/4 \times 79.4\text{cm}^2 \times \pi \times 240\text{cm} / 1,000$
容器内の水素量目標	83kg	= $1,188 \times 0.070$
容器の質量	505kg	
容器の総質量目標	1,040kg	= $1,188 \times 0.070 / 0.080$
容器材質	SM5208	
熱交換器の質量	89kg	=水素貯蔵材料の 20%と仮定
熱交換器の体積	33L	= $89 / 2.7$ (アルミニウム比重)
貯蔵材料の質量	446kg	= $1,040 - 505 - 89$
貯蔵材料の充填率	50%	
貯蔵材料の体積	449L	= $(930 - 33) \times 0.50$
空隙部の水素体積	448L	= $930 - 33 - 449$
空隙部の水素重量	0.36kg-H ₂	= 448×0.0008 (=水素密度@1MPa)
貯蔵材料単体の質量貯蔵密度目標	186g-H ₂ /kg	= $(83 - 0.36)\text{g} - \text{H}_2 / 446\text{kg}$
貯蔵材料単体の体積貯蔵密度目標	184g-H ₂ /L	= $(83 - 0.36)\text{g} - \text{H}_2 / 449\text{L}$

表 2.4.3-3. 2050 年仮目標達成に求められる貯蔵材料単体の仮目標（材料充填率 80%の場合）

容器仕様と貯蔵密度		詳細内容
容器の内容積	930L	
容器の外容積	1,188L	= $1/4 \times 79.4 \text{cm}^2 \times \pi \times 240 \text{cm} / 1,000$
容器内の水素量目標	83kg	= $1,188 \times 0.070$
容器の質量	505kg	
容器の総質量目標	1,040kg	= $1,188 \times 0.070 / 0.080$
容器材質	SM5208	
熱交換器の質量	89kg	=水素貯蔵材料の 20%と仮定
熱交換器の体積	33L	= $89 / 2.7$ (アルミニウム比重)
貯蔵材料の質量	446kg	= $1,040 - 505 - 89$
貯蔵材料の充填率	80%	
貯蔵材料の体積	718L	= $(930 - 33) \times 0.80$
空隙部の水素体積	179L	= $930 - 33 - 718$
空隙部の水素重量	0.14kg-H ₂	= 179×0.0008 (=水素密度@1MPa)
貯蔵材料単体の質量貯蔵密度目標	186g-H ₂ /kg	= $(83 - 0.14) \text{g-H}_2 / 446 \text{kg}$
貯蔵材料単体の体積貯蔵密度目標	115g-H ₂ /L	= $(83 - 0.14) \text{g-H}_2 / 718 \text{L}$

液化アンモニア容器の材質にアルミニウム材を用いると腐食の懸念があるが、低圧水素（1MPa 以下）容器の材質にアルミニウム材を用いても腐食の懸念は小さいと考えられる。そこで容器材質を SM5208（溶接構造用圧延鋼材）からアルミニウム材に変更して、2050 年仮目標「80g-H₂/kg かつ 70g-H₂/L」の達成に求められる貯蔵材料単体の仮目標を試算した。その結果を表 2.4.3-4（材料充填率 50%の場合）と表 2.4.3-5（材料充填率 80%の場合）に示す。貯蔵材料単体の仮目標は「115kg-H₂/kg かつ 118~188g-H₂/L（材料充填率 80%~50%の場合）」となる。

表 2.4.3-4 2050 年仮目標達成に求められる貯蔵材料単体の仮目標
（アルミ容器・充填率 50%の場合）

容器仕様と貯蔵密度		詳細内容
容器の内容積	930L	
容器の外容積	1,188L	= $1/4 \times 79.4 \text{cm}^2 \times \pi \times 240 \text{cm} / 1,000$
容器内の水素量目標	83kg	= $1,188 \times 0.070$
容器の質量	175kg	= $505 \times 2.7 / 7.8$
容器の総質量目標	1,040kg	= $1,188 \times 0.070 / 0.080$
容器材質	アルミニウム	
熱交換器の質量	144kg	=水素貯蔵材料の 20%と仮定
熱交換器の体積	53L	= $89 / 2.7$ (アルミニウム比重)
貯蔵材料の質量	721kg	= $1,040 - 175 - 144$
貯蔵材料の充填率	50%	

貯蔵材料の体積	440L	$= (930-53) \times 0.50$
空隙部の水素体積	437L	$= 930-53-440$
空隙部の水素重量	0.35kg-H ₂	$= 437 \times 0.0008$ (=水素密度@1MPa)
貯蔵材料単体の質量貯蔵密度目標	115g-H ₂ /kg	$= (83-0.35) \text{g-H}_2 / 721 \text{kg}$
貯蔵材料単体の体積貯蔵密度目標	188g-H ₂ /L	$= (83-0.35) \text{g-H}_2 / 440 \text{L}$

表 2.4.3-5 2050 年仮目標達成に求められる貯蔵材料単体の仮目標
(アルミ容器・充填率 80%の場合)

容器仕様と貯蔵密度		詳細内容
容器の内容積	930L	
容器の外容積	1,188L	$= 1/4 \times 79.4 \text{cm}^2 \times \pi \times 240 \text{cm} / 1,000$
容器内の水素量目標	83kg	$= 1,188 \times 0.070$
容器の質量	175kg	$= 505 \times 2.7 / 7.8$
容器の総質量目標	1,040kg	$= 1,188 \times 0.070 / 0.080$
容器材質	アルミニウム	
熱交換器の質量	144kg	=水素貯蔵材料の 20%と仮定
熱交換器の体積	53L	$= 89 / 2.7$ (アルミニウム比重)
貯蔵材料の質量	721kg	$= 1,040 - 175 - 144$
貯蔵材料の充填率	80%	
貯蔵材料の体積	702L	$= (930-53) \times 0.80$
空隙部の水素体積	175L	$= 930-53-702$
空隙部の水素重量	0.14kg-H ₂	$= 175 \times 0.0008$ (=水素密度@1MPa)
貯蔵材料単体の質量貯蔵密度目標	115g-H ₂ /kg	$= (83-0.14) \text{g-H}_2 / 721 \text{kg}$
貯蔵材料単体の体積貯蔵密度目標	118g-H ₂ /L	$= (83-0.14) \text{g-H}_2 / 702 \text{L}$

以上より、2050 年仮目標「80g-H₂/kg 以上かつ 70g-H₂/L 以上」の達成に求められる貯蔵材料単体の仮目標を表 6 に整理する。その中間マイルストーンとして、2050 年仮目標の達成率 60%となる「69g-H₂/kg 以上かつ 71g-H₂/L 以上」を 2040 年仮目標とする。

表 2.4.3-6 2050 年仮目標達成に求められる貯蔵材料単体の仮目標

容器材質	SM5208	アルミニウム
質量貯蔵密度	186g-H ₂ /kg	115g-H ₂ /kg
体積貯蔵密度	115~184g-H ₂ /L (材料充填率 80~50%の場合)	118~188g-H ₂ /L (材料充填率 80~50%の場合)

2.5 FC 材料目標（従来技術の延長による 2030 年頃までの達成シナリオ）

2.5.1 材料目標の考え方

MBD シミュレーションにより、システム性能を成立させるのに必要な BOL および EOL の電流・電圧曲線（以下、電流・電圧曲線を I-V と呼ぶ）が提示された。この目標 I-V を成立させるのに必要な各要素の物性目標を提示する。物性目標の提示は 2 段階で行う。はじめに物性から定常状態の I-V を予測するシミュレータを用い、BOL の目標 I-V を満たす材料物性値を試算する。次にこの試算結果を参考に、実際の測定技術を加味して目標物性を設定する。

目標 I-V を満たす材料物性値を検討するための前提として Pt 目付量を決定する必要がある。米国では HDV 向け FC スタックの 2030 年における Pt 目付量を $0.3[\text{mg cm}^{-2}]$ （空気極 $0.25[\text{mg cm}^{-2}]$ 、水素極 $0.05[\text{mg cm}^{-2}]$ ）[1,2]、FCV 向けでは $0.125[\text{mg cm}^{-2}]$ （空気極 $0.1[\text{mg cm}^{-2}]$ 、水素極 $0.025[\text{mg cm}^{-2}]$ ）[2]。一方、HDV 向けの FC スタックは FCV と比べて、高温領域での要求 I-V 特性を達成するための活性と長時間の耐久性の両立が求められることを鑑み、ここでは Pt 目付量の目標値として $0.24[\text{mg cm}^{-2}]$ （空気極 $0.2[\text{mg cm}^{-2}]$ 、水素極 $0.04[\text{mg cm}^{-2}]$ ）を提案する。

この目標値では、25 トンクラスの大型トラック（FC 定格出力 228kW）で約 43g/台となり、2.3.3 項で示した 2050 年目標の 12.5g/台に比べて約 30g 程度多いが、2.3.1 項で説明したように HDV では TCO のうち初期導入コストの割合が小さいこと（30g 程度では約 10 万円の材料コストアップ）、主要国の目標に対して高い競争力を有することを踏まえると、上記の目標設定は将来的な究極目標を達成するための中間目標として妥当であると考えた。

（参考文献）

[1] “M2FCT: Million Mile Fuel Cell Truck Consortium”, DOE Annual Merit Review and Peer Evaluation Meeting 2021, Project ID# FC339

[2] “Fuel Cell System Analysis”, DOE Annual Merit Review and Peer Evaluation Meeting 2021, Project ID# FC163

2.5.2 要求 I-V 特性を満たすための材料初期物性の検討

本項では、シミュレーションによる検討内容を説明する。シミュレーションには、図 2.5.2-1 に示すモデル[1]を用いる。セルの流路の長さは膜電極ガス拡散層接合体（以下、MEGA）の厚さよりも極めて長く、流路方向の物質の濃度分布は電解質膜に垂直方向のそれよりも無視できるほど小さい。この MEGA の性質に基づき、本モデルでは、熱および物質の輸送現象を流路方向と垂直方向とに分離して取り扱う、いわゆる 1+1D モデルを適用する。この近似では、流路方向のガス組成、流量、温度変化は、各所における流路と MEGA との間のエネルギーおよび物質の保存を考慮することにより計算される。垂直方向の熱および物質輸送は、各所の熱および物質輸送あるいは反応の垂直方向に対する支配方程式を解くことにより得られる。

流路方向のエネルギー・物質保存式は文献[1-4]のとおりであるので説明を割愛する。垂直方向の物質輸送および反応に関わる方程式にも既往の文献[1-4]のものを適用しているが、いくつか本検討固有のモデルを使用しているため簡単に説明する。ガス拡散層（GDL）および触媒層中の圧力差による移流ならびに濃度勾配によるガス拡散に対して Darcy 則・Stefan-Maxwell の式・質

量保存則を、電解質やアイオノマ中のプロトン伝導に関しては電位勾配による伝導を表現する式、電解質中の水輸送に関しては拡散および電気浸透流を表現する式を使用する。そして触媒層中の電極触媒反応に対しては Butler-Volmer 式を適用する。図 2.5.2-1 には、これらの主要な方程式の概要も示している。計算結果を左右するのは、これらの式に現れる物性モデルならびにパラメータである。I-V 特性に特に強く影響する物性として、(1) 電解質のプロトン伝導率、(2) 空気極流路/GDL ガス輸送特性、(3) 空気極触媒層ガス輸送特性、(4) 空気極触媒活性、がある。加えてシミュレーションには、(5) 運転条件の前提が必要である。これらのモデルならびに運転条件の前提に関して以下に説明する。そして本項の最後に、(6) I-V 目標を満たすよう設定した物性を示す。

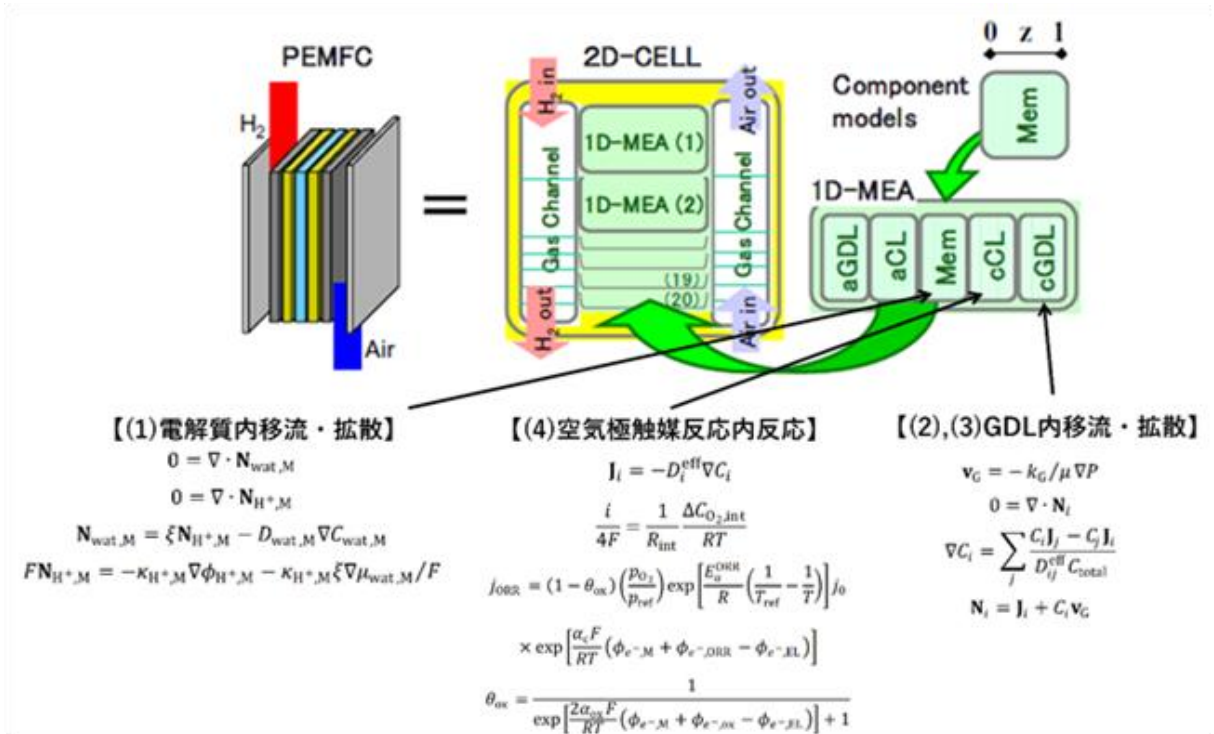


図 2.5.2-1 FC 発電モデルの概要

(1) 電解質のプロトン伝導率

電解質膜、アノード・カソードアイオノマのプロトン伝導率には、様々なフッ素系膜の性質をスルホン酸基 1 モル当たりの電解質重量 (EW: Equivalent Weight) の関数として統一的に表現する下記のモデル[4,5]を適用した。

$$\kappa = 0.5(f - 0.06)^{1.5} \exp \left[\frac{15000}{R} \left(\frac{1}{T_{\text{ref}}} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (2.5.1)$$

$$f = \frac{\lambda \bar{V}_0}{\bar{V}_m + \lambda \bar{V}_0} \quad (2.5.2)$$

$$\bar{V}_m = \frac{EW}{\rho_m} \quad (2.5.3)$$

$$\lambda = \frac{c_1 c_2 a_w}{1 - c_2 a_w} + \frac{c_1 c_2 (c_3 - 1) a_w}{1 + c_2 (c_3 - 1) a_w}, c_1 = 2.671, c_2 = 0.7677, c_3 = 7.269 \quad (2.5.4)$$

κ はプロトン伝導率、 \bar{V}_0 は水のモル体積、 \bar{V}_m は乾燥電解質のモル体積、 ρ_m は乾燥電解質の密度、

λ は電解質中のスルホン酸 1 モル当たりの含水モル量、 a_w は水の相対湿度である。(2.5.3)式に EW を入力すると伝導率が決まる形式となっている。本検討では、電解質膜の EW は補強層を含むものとする。またラジカルクエンチ剤によるプロトン伝導率の低下を加味しない。そして触媒層中の有効プロトン伝導率は、触媒層中のアイオノマ体積分率・屈曲率による低下を加味して電解質の伝導率の 1/3 とした。

(2) 空気極流路/GDL のガス輸送特性

リブにより流路形状が規定されたセパレータを使用する MEGA では、流路中のガスと接しないリブ下の GDL にはガスが供給されにくい等、MEGA 面内に流路形状に由来した不均一性が現れる。本モデルではこうした流路の幾何形状の影響を無視し、3D ファインメッシュのような多孔体流路のように、一様に流路から GDL へとガスが行き渡るものと仮定し、現象を単純化する。そして GDL 中の物質輸送に関しては、上述のとおり下記の Darcy 則、Stefan-Maxwell の式、質量保存の式を組み合わせることで定常解を得る。Stefan-Maxwell の拡散方程式で用いる物質 i と j との間の相互拡散係数 D_{ij}^{eff} は、GDL の空隙率 ε_{GDL} 、屈曲率 τ_{GDL} 、物質の相互拡散係数 D_{ij} を用いて、下記のように表現する。

$$D_{ij}^{\text{eff}} = \frac{\varepsilon_{\text{GDL}}}{\tau_{\text{GDL}}} D_{ij} \quad (2.5.5)$$

細孔径の大きい GDL では分子拡散が支配的であるとし、相互拡散係数 D_{ij} を下記の式により表現する。

$$D_{ij} = \frac{0.001T^{1.75}}{p(v_i^{1/3} + v_j^{1/3})^2} \sqrt{\frac{1}{M_i} + \frac{1}{M_j}} \quad (2.5.6)$$

ここで T は温度、 p は全圧、 v_i は拡散体積、 M_i は分子量である。各々の値に関しては文献[1-3]を参照されたい。

なお本検討で想定した流路/GDL のモデルは上述のとおりであるが、目標 I-V を達成する流路/GDL はこれに限るものではない。(5)の運転条件の項で述べるとおり、様々な流路/GDL の性能を一般化して測る物性指標として、本検討では分子拡散抵抗 R_{mol} を重視し、これよりも小さいか否かがガス拡散性の目標満たす流路/GDL であるか否かを左右すると考える。 R_{mol} の定義に関しては文献[6]を参照されたい。

(3) 空気極触媒層ガス輸送特性

現状の MEGA でよく使用される Pt 担持カーボンとのフッ素系のアイオノマとから成る多孔質体を前提としてシミュレーションを実施する。触媒層中での移流に対しても、GDL と同様に Darcy 則を適用する。触媒層中の拡散に関しては、細孔径の小さい触媒層では Knudsen 拡散が支配的であると考え、以下の Knudsen 拡散モデルを適用する。

$$\mathbf{J}_i = -D_i^{\text{eff}} \nabla C_i \quad (2.5.7)$$

GDL と同様に、有効拡散係数 D_i^{eff} を、触媒層の空隙率 ε_{CL} と屈曲率 τ_{CL} とを用い、下記のように表現する。

$$D_i^{\text{eff}} = \frac{\varepsilon_{\text{CL}}}{\tau_{\text{CL}}} D_i \quad (2.5.8)$$

拡散係数 D_i は下記により計算する。

$$D_i = \frac{2r_K}{3} \left(\frac{8RT}{\pi M_i} \right)^{1/2} \quad (2.5.9)$$

r_K は細孔半径であり本検討では 40 nm とする。 R は気体定数である。

空気極触媒層中のガス拡散でもう一つ重要な点は、アイオノマと触媒との界面に酸素透過抵抗の存在である[7,8]。本検討では、界面抵抗 R_{int} が触媒のラフネスファクタ RF に反比例するとする経験式[8,9]

$$R_{\text{int}} = \frac{560}{RF} \text{ (s m}^{-1}\text{)} \quad (2.5.10)$$

を用い下記のように、界面抵抗による酸素濃度の低下 $\Delta C_{\text{O}_2, \text{int}}$ を表現する。

$$\frac{i}{4F} = \frac{1}{R_{\text{int}}} \frac{\Delta C_{\text{O}_2, \text{int}}}{RT} \quad (2.5.11)$$

F はファラデー定数である。

GDLと同様に、目標 I-V を満たす触媒層構造は、本検討で前提とした構造に限るものではない。本検討では、多様な触媒層構造のガス拡散性を一般化して測る指標として、分子拡散抵抗以外のガス拡散抵抗 R_{other} を重視し、これよりも小さいか否かがガス拡散性の目標満たす触媒層であるか否かを左右すると考える。 R_{other} の定義に関しても文献[6]を参照されたい。

(4) 空気極触媒活性

空気極触媒活性を規定する酸素還元反応モデルには、以下の酸化被膜による被毒効果を考慮した簡易モデル[1]を使用する。

$$i = (1 - \theta_{\text{ox}}) \left(\frac{p_{\text{O}_2}}{p_{\text{ref}}} \right) \exp \left[\frac{E_a^{\text{ORR}}}{R} \left(\frac{1}{T_{\text{ref}}} - \frac{1}{T} \right) \right] i_0 \exp \left[\frac{\alpha_c F}{RT} \eta_{\text{ORR}} \right] \quad (2.5.12)$$

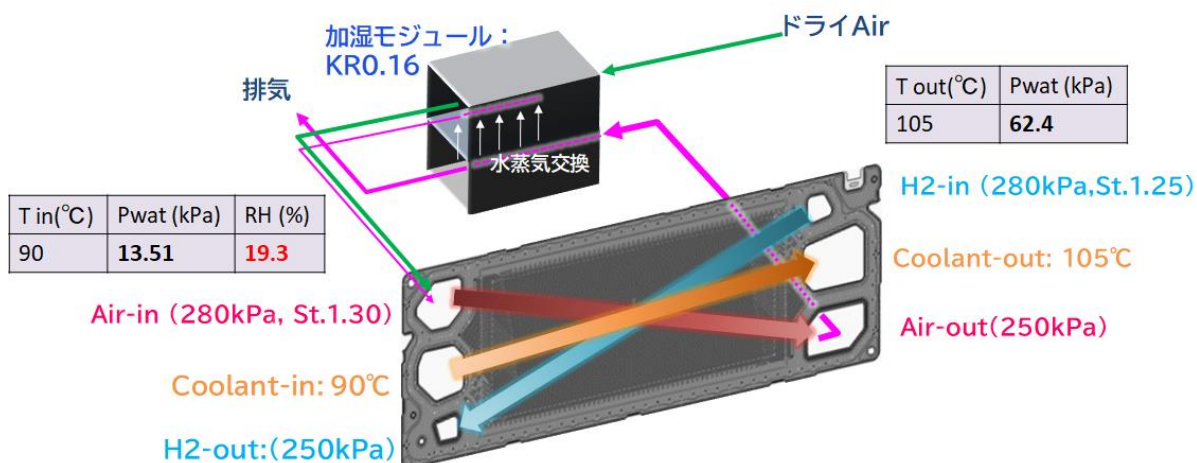
$$\theta_{\text{ox}} = \frac{1}{\exp \left[\frac{2\alpha_{\text{ox}} F}{RT} \eta_{\text{ox}} \right] + 1} \quad (2.5.13)$$

p_{O_2} は酸素分圧、 p_{ref} は基準圧力、 E_a^{ORR} は酸素還元反応の活性化エネルギー（ガス中の酸素を基準とする）、 i_0 は交換電流密度、 α_c は移動係数、 η_{ORR} は過電圧、 α_{ox} は酸化被膜形成の移動係数、 η_{ox} は酸化被膜形成の過電圧である。本検討では、 E_a^{ORR} に、文献[10]の電解質の酸素を基準とした有効活性化エネルギー 38 kJ/mol を、電解質中の溶存酸素濃度の実測値[11]で補正した活性化エネルギー 17 kJ/mol を用いる。また酸化物形成の η_{ox} を酸化物形成の平衡電位 0.75 V (RHE)として定義する。

(5) 運転条件

図 2.5.2-2 に運転条件の前提を示す。空気極出口から排気されるガス中の水蒸気量の 16 %を、空気極入口ガスへと交換する加湿システムを想定し、運転条件は、空気極入口全圧 280kPa (酸素濃度 20.8%)、空気極入口湿度 20%RH、空気極出口圧力 250kPa (2.0 A cm⁻²時)、燃料極入口全圧 280 kPa、燃料極入口無加湿、燃料極出口全圧 250 kPa、冷却水入口温度 90°C、冷却水出口温度 105°Cとし、エジェクタによる水素循環を考慮する。水素循環は、燃料タンクからの水素ガスに対する燃料極出口からのガスの質量流量比が 5 となるように設定する。セル構成は、面積 273cm²、燃料極・空気極対向流とする。ただし出口の全圧は成り行きで決まるため、想定した圧

力 250 kPa から±10 kPa 程度のずれがある。空気極および燃料極のストイキ比はそれぞれ 1.3 および 1.25 と設定する。上記の計算に加え、前述した GDL の分子拡散抵抗 R_{mol} と触媒層内の酸素輸送抵抗 R_{other} とを抽出するためのシミュレーションも行う。本計算では、実験での抽出法[6, 8]を参考に、電極面積を 1 cm²、セル温度 80°C、相対湿度 90%RH、燃料極流量 1 L/min、空気極流量 2 L/min（酸素濃度 5%）とし、空気極の全圧を 100~250 kPa と変化させた際の限界電流密度から、酸素輸送抵抗を抽出する。



連続定格点 (105°C運転条件) / 水素循環あり			
電極面積	273 cm ²	Air 入圧 / 出圧	280 / 250 KPa
動作点電流	2.0A cm ⁻²	加湿モジュール出圧	240 KPa
H2 ストイキ比	1.25	水蒸気交換量	16 %
Air ストイキ比	1.30	セル入口冷却水温度	90 °C
H2 入圧 / 出圧	280 / 250 KPa	セル出口冷却水温度	105 °C

図 2.5.2-2 想定するシステム構成および運転条件

(6) 目標 I-V 満たすよう設定した物性ならびに I-V 曲線

MBD シミュレーションにより提示された BOL の目標 I-V を満足する物性パラメータを検討した。検討は、低電流密度域 (0.2 A cm⁻² 付近) での電圧を満たすよう交換電流密度 i_0 を調整、中電流域 (2 A cm⁻² 付近) での電圧を満たすよう電解質の EW を調整、高電流域 (3 A cm⁻² 以上) の電圧を満たすよう GDL・触媒層のガス拡散抵抗を調整する流れとした。表 2.5.2-1 に物性パラメータを示す。また図 2.5.2-3 にシミュレーションにより得た発電特性を示す。

表 2.5.2-1 シミュレーションで設定した物性値

要素	物性	物性値 (目標値)	備考
電解質膜	H ⁺ 伝導率@120°C, 30%RH	0.032 S cm ⁻¹	厚さ 8 μm の EW600(補強層込み)のフッ素系膜を想定し、普遍モデル[4, 5]を用いて算出。計算においてラジカルクエンチ剤による伝導率の低下は加味していない。なおモデル(2.5.1)~(2.5.4)式は実測されるプロトン伝導率よりも低い値を与える。実質的にはより高い EW により、本伝導率は達成されると推測される。
	H ⁺ 伝導率@100°C, 40%RH	0.041 S cm ⁻¹	
	H ⁺ 伝導率@ 80°C, 80%RH	0.117 S cm ⁻¹	
空気極 触媒層	Pt 目付量	0.2 mg cm ⁻²	
	ECSA	60 m ² g ⁻¹	
	質量活性@100°C, 100%RH, O ₂ 分圧 100 kPa _{abs} , 0.9 V	1810 A g ⁻¹	電解液中の溶存酸素濃度変化を補正した速度定数の活性化エネルギーの実測値 (38 kJ mol ⁻¹) [10]と電解質への酸素溶解度[11]を用い、気相中の酸素を基準として算出した活性化エネルギー 17 kJ mol ⁻¹ を使用。
	質量活性@80°C, 100%RH, O ₂ 分圧 100 kPa _{abs} , 0.9 V	1740 A g ⁻¹	
	アイオノマ H ⁺ 伝導率 @120°C, 30%RH	0.032 S cm ⁻¹ (0.129 Ω cm ²)	EW600 のフッ素系アイオノマを想定し、普遍モデル[4, 5]を用いて算出。括弧内の値は、触媒層中のアイオノマの有効プロトン伝導率 κ_{eff} (先の値の 1/7 と設定)と触媒層厚さ δ_{CL} とから、 δ_{CL}/κ_{eff} として算出。なおモデル(2.5.1)~(2.5.4)式は実測されるプロトン伝導率よりも低い値を与える。実質的にはより高い EW により、本伝導率は達成されると推測される。
	アイオノマ H ⁺ 伝導率 @100°C, 40%RH	0.041 S cm ⁻¹ (0.101 Ω cm ²)	
	アイオノマ H ⁺ 伝導率@ 80°C, 80%RH	0.117 S cm ⁻¹ (0.035 Ω cm ²)	
	電子伝導率	2.0 S cm ⁻¹	
	触媒層内 O ₂ 拡散抵抗	10 s m ⁻¹	Pt 目付量および ECSA から算出される RF より、DE2020 を想定した文献[9]の式を HOPI の界面抵抗[8]となるよう補正した式 $R_{int}=560/RF$ (s m ⁻¹)にて界面抵抗を定義。左記拡散抵抗値は図 2.3.3 (C)の切片より導出。
	I/C	1.0	
	触媒層厚さ	6 μm	触媒層厚さが 6 μm となるよう空隙率を調整。
Pt 担持率	60 wt%		
燃料極 触媒層	Pt 目付量	0.04 mg cm ⁻²	EW600 のフッ素系アイオノマを想定し、普遍モデル[4, 5]を用いて算出。なおモデル(2.5.1)~(2.5.4)式は実測されるプロトン伝導率よりも低い値を与える。実質的にはより高い EW により、本伝導率は達成されると推測される。
	アイオノマ H ⁺ 伝導率 @120°C, 30%RH	0.032 S cm ⁻¹	
	アイオノマ H ⁺ 伝導率 @100°C, 40%RH	0.041 S cm ⁻¹	
	アイオノマ H ⁺ 伝導率@ 80°C, 80%RH	0.117 S cm ⁻¹	
	電子伝導率	2.0 S cm ⁻¹	
	I/C	1.2	
	触媒層厚さ	2 μm	
Pt 担持率	20%		
空気極 流路/GDL	GDL 厚さ	50 μm	例えば 3D ファインメッシュ等を想定し、GDL に一様にガスが行き届くと想定。 $\varepsilon_{GDL}=0.75$, $\tau_{GDL}=7$ と設定。分子拡散抵抗は、図 2.5.2-3 (C)の勾配より導出。
	分子拡散抵抗	18 s m ⁻¹	
	電子伝導率	4.9 S cm ⁻¹	
燃料極 流路/GDL	GDL 厚さ	150 μm	例えば 3D ファインメッシュ等を想定し、GDL に一様にガスが行き届くと想定。
	電子伝導率	2.7 S cm ⁻¹	
セパレータ関係	接触抵抗	6.5 mΩ cm ²	セパレータ/セパレータ、セパレータ/GDL、全接触抵抗の合計値。

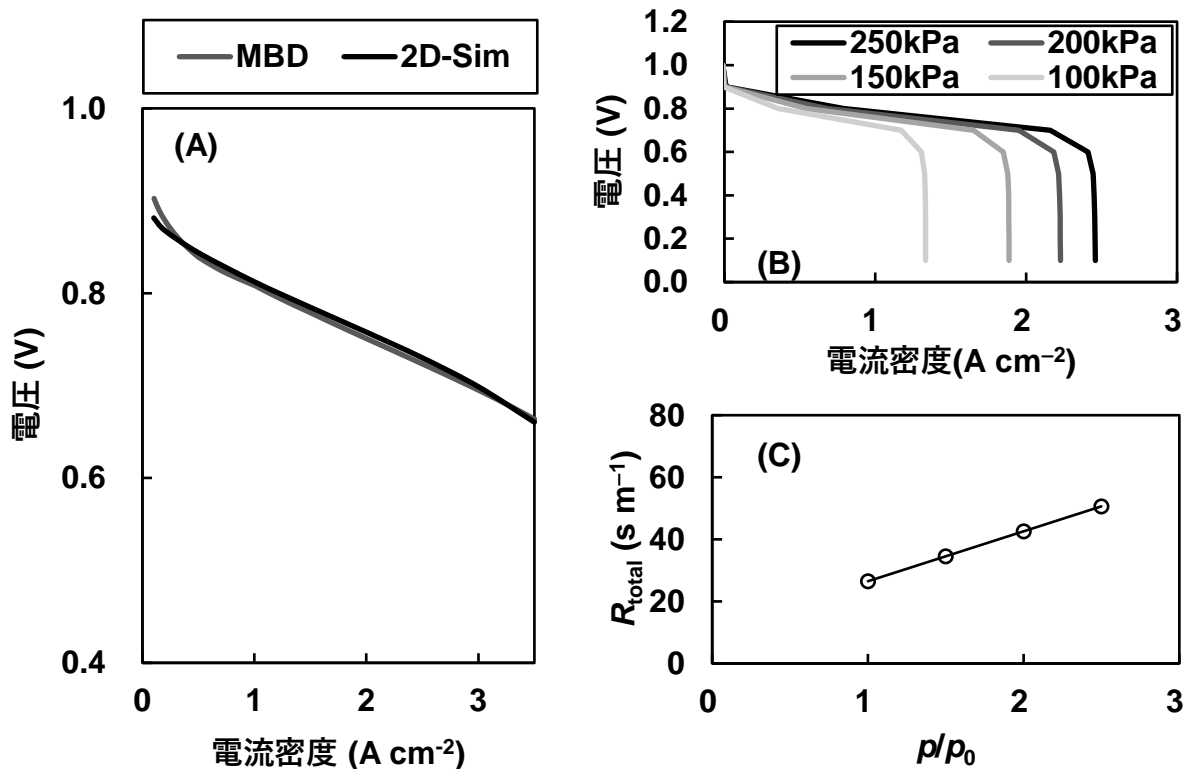


図 2.5.2-3 電流電圧曲線

(A)発電性能(MBD: MBD による目標 I-V, 2D-Sim.:本検討結果)、(B)および(C) ガス拡散抵抗抽出シミュレーションの結果、基準圧力 $p_0 = 100 \text{ kPa}_{\text{abs}}$ (C)の傾きおよび切片から R_{mol} および R_{other} を算出

(参考文献)

- [1] N. Nonoyama and Y. Ikogi, *ECS Trans.* **16** 13-21 (2008).
- [2] A. Z. Weber and J. Newman, *Chem. Rev.* **104** 4679-4726 (2004).
- [3] A. Z. Weber and J. Newman, *J. Electrochem. Soc.* **153** A2205-A2214.
- [4] A. Z. Weber and J. Newman *J. Electrochem. Soc.* **151** A311-A325 (2004).
- [5] S. Shi, A. Z. Weber and A. Kusoglu *Electrochim. Acta* **220** 517-528 (2016).
- [6] Y. Ono, T. Mashio, S. Takaichi, A. Ohma, H. Kanesaka and K. Shinohara *ECS Trans.* **28**, 69-78 (2010).
- [7] R. Jinnouchi, K. Kudo, N. Kitano and Y. Morimoto *Electrochim. Acta* **188** 767-776 (2016).
- [8] R. Jinnouchi, K. Kudo, K. Kodama, N. Kitano, T. Suzuki, S. Minami, K. Shinozaki, N. Hasegawa, A. Shinohara *Natur. Commun.* **12** 4956 (2021).
- [9] A. Kongkanand and M. F. Mathias, *J. Phys. Chem. Lett.* **7** 1127-1137 (2016).
- [10] H. Uchida, K. Izumi, and M. Watanabe *J. Phys. Chem. B* **110** 21924-21930 (2006).
- [11] Z. Zhu, Q. Liu, X. Liu, and J. Shui *J. Phys. Chem. C* **124** 3069-3079 (2020).

2.5.3 主要材料の物性目標

2.5.2 項で述べた初期の目標 I-V 特性を満たすための物性パラメータを根拠に、主要材料の物性目標の項目と目標値を表 2.5.3-1 のように定めた。また、参考のため、その各項目の現行材料からなる MEA での物性、特性値の実測値も併せ示した。

表 2.5.3-1 主要材料の物性目標 ★は、今後測定

要素	項目		2030 年頃の目標値		実測値			
			物性値	仕様・特性値	Gen2 MIRAI ※8	一般材料		
空気極触媒 (層)	PGM 目付量(mg/cm ²)			0.20	0.17	0.20	田中貴金属 Pt/C TEC10V30E ※9	
	ECSA (m ² /g)		60		48	61		
	質量活性 (A/g) @0.9V	at100°C、100%RH	1810		★	★		
		at80°C、100%RH	1740		500	95		
	触媒層厚さ(μm)			6.0	9.1	7.4		
	触媒層ガス拡散抵抗 (s/m)	at 80°C, 80%RH	10		9.1	18.1		
電解質	膜	膜厚 (μm)			8.0	8.5	25	Chemours Nafion™ NR211 ※9
		H ⁺ 伝導率 (S/cm) ※1	at 120°C, 30%RH	0.032		0.018	0.016	
			at 100°C, 40%RH	0.041		0.027	0.024	
			at 80°C, 80%RH	0.12		0.106	0.086	
			at -30°C, 0%RH※2	今後設定		★	★	
	水素透過性	※3	今後設定		★	★		
	酸素透過性	※4	今後設定		★	★		
	機械強度 ※5	(暫定) 引張最大強度(MPa) at 23°C, 50%RH		今後設定		50	30	
		(暫定) 引張破断伸び(%) at 23°C, 50%RH		今後設定		★	250	
	アイオノマ	H ⁺ 伝導率 (S/cm)	at 120°C, 30%RH	0.032		—	★	Chemours Nafion™ D2020 触媒層抵抗 ※9
			at 100°C, 40%RH	0.041		—	★	
at 80°C, 80%RH			0.12		—	★		
空気極触媒層抵抗(Ωcm ²)		at 120°C, 30%RH		0.13	0.77	0.37		
		at 100°C, 40%RH		0.10	0.41	0.24		
	at 80°C, 80%RH		0.035	0.10	0.060			
GDL・流路・セパレータ	GDL 面積抵抗 (Ωcm ²)			0.0010	★	<0.01	SGL CARBON Sigracet® 22BB ※10 分子拡散抵抗 ※9	
	流路・GDL(分子拡散抵抗) (s/m) ※6	at 80°C, 80%RH		18	58.3 (並行流路)	60.8 (並行流路)		
		GDL/セパ、セパ/セパ等:接触抵抗合計 (Ωcm ²)			0.0065	★		—
	GDL 機械強度物性 ※7	(暫定)圧縮弾性率		今後設定		★		
(暫定)曲げ剛性 (N/mm)		今後設定		★	0.9 ~1.5			

※1：電解質膜の H⁺伝導率は、補強材込みの伝導率。クエンチャ添加など、耐久性を担保した状態での伝導率。

※2：低温起動性に影響する因子。スタックとしての要求仕様を集約したうえで設定。

※3、※4：耐久性、燃費に影響する因子。今後、設定。

※5：セルの構造・仕様により必要な物性値が異なると考えられることから、当面、指標となる物性項目は仮置き。

目標値とともに今後の議論とする。ここでは、現行材料の物性を参考値として示す。

※6：GDL と流路の構造との組み合わせで決まる特性値。

※7:セルの構造・仕様により必要な物性値が異なると考えられることから、当面、指標となる物性項目は仮置き。目標値とともに今後の議論とする。ここでは、現行材料の物性を参考値として示す。

※8: 第二世代 MIRAI の MEA を用いた実測値、解析結果。(FC-Cubic 測定)

※9: 触媒: 田中貴金属 TEC10V30E、カソード触媒担持量: 0.2mg-Pt/cm²、アノード触媒担持量: 0.1mg-Pt/cm²、アイオノマ: Chemours Nafion™ D2020、I/C:1.0、電解質膜: Chemours Nafion™ NR211、GDL: SGL-CARBON SIGRACET® 22BB からなる MEA で測定した値。(FC-Cubic 測定)

※10: メーカー公表値 <https://www.sglcarbon.com/en/markets-solutions/material/sigracet-fuel-cell-components/>

これら材料目標一覧に示されている特性の測定手法は、「NEDO PEFC セル評価解析プロトコル」にまとめられている。下記に現在、FCV 向けに決まっている評価手法について示す。

実際の測定手法に関しては、NEDO、FCCJ (燃料電池実用化推進協議会)、技術研究組合 FC-Cubic のホームページに掲載される「NEDO PEFC セル評価解析プロトコル」に記載されている。

表 2.5.3-2 材料特性の測定手法

部位・抵抗要素		項目	評価手法
空気極触媒		ECSA	C-2(Ⅲ-3-4)CV 評価方法(ECA 測定方法)
		質量活性(ORR 活性)※1	C-4(Ⅲ-3-2)ORR 活性評価方法
		ガス拡散抵抗(s/m)	C-6 酸素拡散抵抗(電極触媒層)
電解質	膜	H ⁺ 伝導率: 膜単体※2	M-1(Ⅲ-1-1)プロトン伝導度測定方法
		H ⁺ 伝導率: MEA※2	M-5 プロトン輸送抵抗(電解質膜)
		水素透過性	M-6 ガス透過性測定方法(水素/酸素)
		酸素透過性	M-6 ガス透過性測定方法(水素/酸素)
		引張強度※3	
	アイオノマ	H ⁺ 伝導率※2	M-5 プロトン輸送抵抗
		空気極触媒層抵抗※2	C-7 プロトン輸送抵抗(触媒層)
GDL		ガス拡散抵抗(s/m)	G-1 酸素拡散抵抗(拡散層)
		面積抵抗(Ωcm ²)※3	
		圧縮弾性率※3	
		曲げ剛性(N/mm) ※3	

※1: 現在、測定手法として記載されているのは 80℃の条件。100℃の測定手法は現在、検討中で今後、追加される予定。

※2: 現在、測定手法として記載されているのは 80℃までを想定した手法。80℃より高い温度での測定手法については今後、追加される予定。

※3: 現在、測定手法について検討中。今後、追加予定。

2.5.4 現状の課題と目標達成に向けた開発の方向性

図 2.5.2-3 では、FC 単セルを構成する各材料の物性（表 2.5.2-1）を積み上げ、図 2.5.2-2 で想定するセル・システム構成および運転条件での電流電圧曲線をシミュレーション（2D-Sim.）により予測した。同条件（連続定格点）のシミュレーションにおいて、セル面内環境分布を各パラメータ（電流密度 i 、相対湿度 RH、酸素分圧 P_{O_2} 、電解質膜面温度 T_{mem} ）に分離し、図 2.5.4-1 にそれぞれ示した。図中の横軸は、空気入口から出口までの相対距離を示している。特に電解質膜面温度 T_{mem} のセル面内における最高温度は、セル出口冷却水温度の+5~10°Cとなることが試算によって示された。2030 年に向けた材料の作動上限範囲を 120°C（セル出口冷却水温度 105°C）として、-30°Cから 120°Cに至る広範囲な温度条件で作動できることを材料要件として定めた。

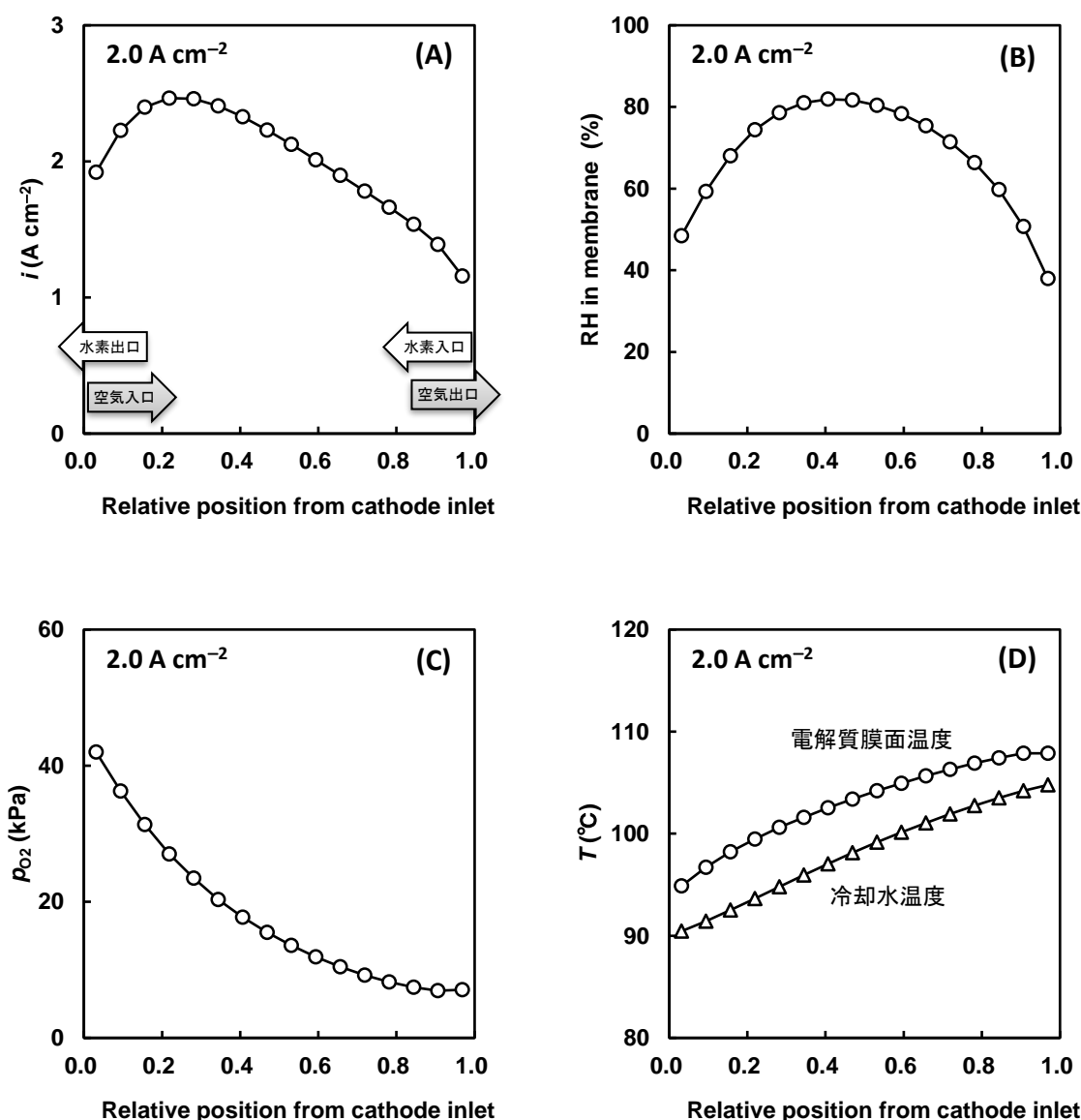


図 2.5.4-1 連続定格点運転（図 2.5.2-3 の 2D-Sim.電流電圧曲線）における FC セル面内の (A)電流密度分布、(B)相対湿度分布、(C)酸素分圧分布、(D)温度分布、図中△は冷却水温度、○は電解質膜面温度

(1) 電解質材料

①電解質膜

電解質膜は、FC スタックの重要な構成要素であり、20% (ただし、氷点下環境は 0%) から 100% の相対湿度 (RH) 範囲、および -30°C から 120°C の温度範囲で要求されるプロトン伝導性を実現し、かつ広範囲の作動条件に耐えうる耐久性が求められる。また、電解質膜のコストを考えると、膜の化学的耐久性、機械的耐久性に加え、膜の薄膜化も重要である。さらに、薄膜化は膜抵抗を決める重要な要因でもある。こうした課題を踏まえ、2030 年頃の目標に対応する電解質膜として以下の開発が求められる。

- (i) 電解質膜には、 80°C 、80%RH の高加湿状態から、電解質膜面最高温度 120°C 、30%RH の低加湿状態においても要求されるプロトン伝導性を実現できる性能が求められる。
- (ii) 電解質膜材料はフッ素系高分子、炭化水素系高分子などが考えられ、その膜には $10\mu\text{m}$ 以下の薄膜化が求められる。膜強度を高めて薄膜化を実現するには、補強層を組み込んだ電解質膜を開発する必要がある。
- (iii) 電解質膜には化学的耐久性 (主にラジカルによる膜の破損) が求められる。化学的耐久性の向上には、ガスバリア性の高い膜の開発が必要である。さらに、ラジカルクエンチ剤を電解質膜に導入することは必須であり、ラジカルクエンチ剤導入後もプロトン伝導性が影響を受けない電解質膜を開発する必要がある。
- (iv) 電解質膜には機械的耐久性が求められる。膜には作動条件により変化する温度、湿度に対応できる弾性、剛性が求められる。

さらに、2.2.2 項(6)の今後の課題で述べたように、2030 年以降については最高温度 120°C をさらに超えた作動条件に対応することが必要である。

- (i) 電解質膜には、 80°C 、80%RH の高加湿状態から、電解質膜面最高温度 $>120^{\circ}\text{C}$ 、かつ極低加湿においても要求されるプロトン伝導性を実現できる性能が求められる。
- (ii) 電解質膜は $10\mu\text{m}$ 以下の薄膜化が求められるため、補強層を組み込んだ電解質膜を開発する必要がある。
- (iii) 電解質膜には化学的耐久性と機械的耐久性が求められる。

②アイオノマ (電極用)

電極となる触媒層内には、触媒とカーボン担体以外に触媒等とのバインダとして、また電解質膜との接着性機能も担うアイオノマが必要である。

- (i) アイオノマは、電解質膜との接着性を考慮して、フッ素系高分子、炭化水素系高分子などが用いられている。
- (ii) アイオノマには、従来の作動条件を満たしつつ、 -30°C から 120°C の広範囲な作動条件において、要求性能を満たすプロトン伝導性と酸素透過性、および Pt 系触媒への特異吸着の緩和が求められる。
- (iii) アイオノマのプロトン伝導性、酸素透過性の向上は、アイオノマの使用量の最適化にもつながり、触媒表面の酸素輸送抵抗のみならず、触媒層の二次細孔内の酸素輸送抵抗 (目標 10 s m^{-1} 以下)、プロトン抵抗の低減にもつながる。
- (iv) 触媒層全体への酸素拡散性向上のために、アイオノマの被覆形態の制御も求められている。

(v) Pt 系触媒へのアイオノマの特異吸着は触媒活性に影響し、その程度は生成水・湿度により変化する。この影響の緩和にはアイオノマの直鎖及び側鎖の分子構造の工夫と共に、添加物の利用も重要である。今後導入が予想されるホスホン酸基でも特異吸着の影響が予想されており、FC の作動環境下での安定性も加味しつつ、その緩和を検討する必要がある。

(2) 電極触媒

①空気極触媒

-30°Cから 120°C の広範囲な作動条件に適応し、性能と耐久を両立させる触媒開発が重要である。中期的には HDV の要求性能に即した触媒活性と耐久性の更なる向上・新たな機能付与が必要と見込んでいる。従来の Pt 系ナノ粒子の原子配列制御（合金・スキン・コアシェル等）や形状制御（ナノワイヤ・ナノロッド・シート・連結等）は酸素還元に影響する反応分子種の表面吸着状態や電子状態を制御して律速反応を促進させている。これまでの多くの研究成果の積み上げにより触媒活性の向上に大きく貢献しており、今後は耐久性・触媒層設計・コストの観点など製品化を見据えた段階へフェーズシフトも視野に入れ、一部の先行研究を参考に作動条件下での安定性も加味しながら研究の加速が期待される。触媒活性の向上には組成、形態、修飾、相互作用の観点からの新たなアプローチも必要である。Pt 系ナノ粒子とカーボン等担体にて構成される触媒微粒子に第三の添加物を加えることは、表面吸着、電子状態、移動凝集等に作用して、性能・耐久の向上が見込まれる。多くの試みは高い電気化学的活性表面積の維持や、FC 環境下にて耐久性などの検証が必要であるものの、単に性能比較に留まらず性能向上の主要因と劣化抑制のメカニズム解明も並行して進め、新たなアイテムとして発展させるべきである。非貴金属触媒は Pt 使用量削減の観点も踏まえ、長いスパンで取り組む必要がある。Pt 系触媒が発展した理由はいくつかあるが、Pt の高活性、カーボンの高電気伝導性と高比表面積の有する微細構造の制御等が上げられる。つまり、必要な機能を各材料要素へ分離して個々に性能向上を図り、それらの接合界面と分散性を制御しつつ融合を図る思想も非貴金属触媒の開発には必要と思われる。近年では高活性を示す非貴金属材料等の報告もあり、それらに親和性のある担体と電気伝導性と化学的安定性に配慮しながら組み合わせるなど、これまでの知見も積極的に活用した挑戦的な試みも期待される。担体に関してはカーボンを中心に研究が進み、表面微細構造から凝集形態、表面結晶性から吸着特性まで詳細に検討され、移動体用途に必要な触媒活性と物質輸送特性をもつ触媒層の開発まで進んでいる。速度論的要素や局所的な電位変動、転極等によりカーボンの劣化速度は大きく異なるが、劣化を抑制する新しい機能の付与もしくは運転条件の明確化により、HDV 等にアプローチする必要がある。近年注目されている Pt ナノワイヤ・ナノロッドの活性向上要因が解明され、それらに適するカーボン微細構造を設計することも今後重要と思われる。非カーボン担体に関してはその化学的安定性、FC の作動環境下で安定な化学的組成・微細構造・合成条件などの議論が進みつつあり、種々の酸化物などの複合的な機能材料としての議論を踏まえて発展が求められる。電子伝導性、物質輸送特性、表面微細構造等、カーボンで具現化した重要な特性を非カーボン担体でもカバーすると共に、カーボン担体では求め難い機能（電子的相互作用・界面相互作用等）を積極的に利用した新たな触媒設計へ発展させる必要もある。

②水素極触媒

水素極触媒には、 -30°C から 120°C の広い温度範囲で、高い水素酸化反応（HOR）活性と耐久性の両立が求められる。また、停止時には電解質膜を透過した O_2 によって空気電位付近になるため、耐酸化性も必要である。それらに加え、電解質膜の耐久性向上に資する新たな機能も重要視されている。電解質膜を化学劣化するOHやOOHなどのラジカルは主に水素極で発生する。まず、電解質膜を透過した O_2 が白金系水素極触媒上の吸着水素 H_{ad} と反応して H_2O_2 が生成し、これが金属イオン等と反応してラジカルが発生する。電解質膜の劣化抑制のためにラジカルクエンチ剤が膜に添加されているが、膜やアイオノマのプロトン伝導率の低下や空気極の性能低下が起こる。それゆえ、 H_2O_2 生成を抑制する水素極触媒や触媒層の開発が、電解質膜の耐久性と性能向上に重要である。これまでにPt合金触媒により H_2O_2 生成が抑制されることが報告されている。

天然ガス等を改質・精製した水素燃料には、極微量のCO（規制値 <0.2 ppm）、アンモニア（ <0.1 ppm）や H_2S （ <4 ppb）などの不純物が含まれている。水素極では、水素のみが消費されるため触媒層出口、特に燃料循環により不純物濃度が上昇する。触媒被毒を避けるために燃料パーズを頻繁に行うと、燃料利用率が低下する。それゆえ、不純物耐性が高い触媒の開発が重要である。被毒作用が大きいのは吸着力が強いCOと H_2S である。吸着COの一部は電解質膜を透過する O_2 によって酸化除去されることも見出されているが、やはり高い被毒耐性、HOR活性と耐酸化性を有する触媒開発が望ましい。なお、COを水素電位付近の低い電位で酸化除去する能力は必ずしも必要ではなく、CO吸着を弱められればHOR活性は維持できる。他方、白金系触媒に H_2S はSとして吸着し、空気を導入しても酸化除去できない。HDVの水素使用総量は乗用車の約40倍と見積られるので、Sの蓄積を防ぐ対策として H_2S の吸着抑制や新しい除去法の開発が必要である。

触媒のロバスト性の観点から、燃料欠乏時の転極耐性も注目されている。セルを直列接続したスタックの一部で流路凍結などにより燃料欠乏が起こると、水素極では本来のHORが進行する代わりに炭素担体の酸化が起こる（空気極よりも電位が高くなる：転極）。足場を失ったPtナノ粒子は凝集・脱落する。ごく短時間の転極でも従来のPt/C触媒は致命的なダメージを受ける。そのため、燃料利用率を低くして転極を回避し、万一に備えて制御機器が組み込まれている。触媒に転極耐性があれば、効率の向上とシステムの簡略化による低コスト化が可能になる。

炭素担体の酸化を抑制するために、IrOx等の酸素発生反応（OER）触媒添加の有効性が報告されている。しかし、水素製造用高分子形水電解の実用化に伴って、埋蔵量が希少なIr価格が急騰しており、Ir使用量の極小化、Ir代替OER触媒の開発、炭素以外の耐酸化性担体（燃料欠乏時に無害な酸化反応が必要）の開発が進められている。

（3）ガス拡散電極

高出力密度化を図る上で物質輸送性能の向上が不可欠である。そしてI-V特性の目標（@2030年）を達成するためには、とりわけGDL、MPLの酸素拡散抵抗の低減が必要となる。これらの部材は高酸性雰囲気中で電子伝導性を保持する必要性から、主にカーボン多孔質体が用いられる。特に電解質膜や触媒層の安定保持のために高い剛性を有する必要があるため、GDLは炭素繊維から成る不織布構造が用いられる。また触媒層との良好な接触界面を有する必要があるため、MPLはカーボンブラックの粒子堆積構造が用いられている。拡散抵抗 $[\text{s m}^{-1}]$ は部材厚み $[\text{m}]$ を多孔体の

有効酸素拡散係数 $[m^2 s^{-1}]$ で割った値であり、この有効拡散係数は空隙率の正のべき乗で表される。またこのべき指数は多孔体の幾何形状に依存する。すなわち各部材を(i) 薄くする、(ii) 空隙率を上げる、(iii) 幾何形状を工夫することが拡散抵抗低減に繋がる。しかし酸素輸送以外の機能(電子伝導、MEAの安定保持等)もGDL、MPLには求められており、つまり、如何にこれら他機能を損なうことなく(i)~(iii)を進めることができるかが鍵となる。さらにリブチャネル構造を有する流路を用いた場合、リブ部(GDLと接触する面)直下に酸素を拡散させる必要があるが、GDLの薄層化はこの均一拡散を妨げることに繋がる。以上より、GDL、MPLの酸素拡散抵抗の低減を進める上で、他機能の損失緩和を常に念頭に置く必要がある。ただし電解質膜や触媒層などの各部材の特性によって、GDL・MPLに求める要件は変わる可能性がある。また流路もエンジアリングとして多様な形状が提案されており、これら他部材の組み合わせの上で、最適なGDL・MPLを検討する必要がある。なお多孔体の物質輸送性能の理論値は算出可能であるが、現状部材の酸素輸送性はその理論値よりも低く、つまり現状材料でも内部構造の工夫により、性能向上の余地はあると言える。そのためにも多孔構造が酸素拡散抵抗に及ぼす影響を明らかにすることも重要である。また触媒層も同様に酸素拡散抵抗(二次細孔内、触媒粒子近傍のアイオノマ内、多孔性担体内など)の低減が必要であるが、プロトン・電子輸送との両立に加え、電極触媒の有効利用率や安定性も考慮した構造設計が必要となる。

(4) MEA

(1)~(3)までの部材を組み合わせるMEA(Membrane Electrode Assembly)とする際にも、その製造や構造制御が極めて重要となる。触媒層は、インク調整、分散、混練、塗布、乾燥、圧着を経て形成されるが、その各製造工程に依存して内部の微細構造が変化する。そして物質輸送性や有効触媒表面を左右し、発電特性が大きく変わる。したがってこれらの各工程の現象解明や新たな製造工程の検討も必要である。また電解質膜、触媒層、ガス拡散層、その他シール部材の組み合わせによって、各部材の必要特性も変わる。例えば電解質膜の力学強度次第で、それをサポートする他部材の必要剛性も変化する。

2.5.5 主要材料コストの目安

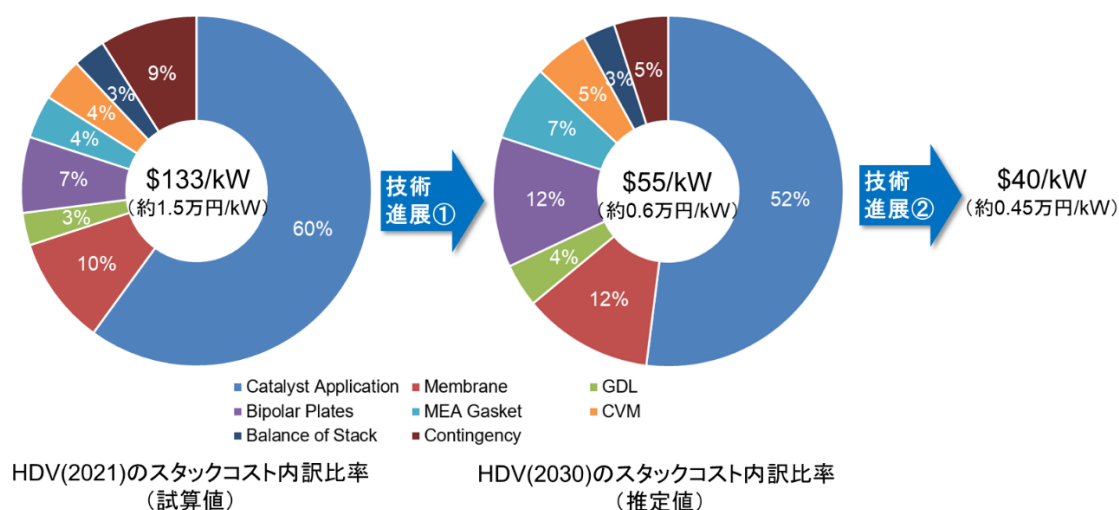
図2.3.1-1で示したとおり、HDV用FCスタックのコスト目標は0.45万円/kW(システムコストの50%)としたが、スタックを構成する主要部材のコスト目安について、DOEが公表した2021年におけるHDVのスタックコスト内訳に関する分析結果、および2030年に向けた技術進展によるコスト低減の考え方[1]に基づいて検討した。

スタックの年産10万台を前提とした、HDVのスタックコスト内訳比率に関する2021年の試算値、および技術進展による2030年の想定値を図2.5.5-1に示す。スタック総コストに対してMEAおよびGDLが占める割合は2/3程度となっている。Pt使用量の低減および出力密度向上による材料・部品使用量の低減を想定した場合、スタックコストは133ドル/kW(約1.5万円/kW)から55ドル/kW(約0.6万円/kW)となる(技術進展①による効果)。さらに上記のスタックのコスト目標を達成するために、低コスト材料の適用や大量生産プロセス技術の確立によるコスト低減が必要と考えられる(技術進展②による効果)。

これらのシナリオに基づいて、2030年頃のHDV用スタックに要求される主要部材のコストの

目安を表 2.5.5-1 のように設定した。部材別のコスト内訳比率については図 2.5.5-1 に示した 2030 年の推定値を前提とし、1 スタックあたりの出力 100kW、アクティブエリア面積 273cm²、セル数 330 枚（アクティブエリア面積の総和 9.0m²）として算出した。Pt 目付量は今回の目標値として空気極と水素極の合計で 0.24mg/cm² であり、DOE の 2030 年の目標値に対して少量であるため、さらに低コストを目指す考え方もあり得るが、DOE の電極触媒の前提材料が Pt/HSC (High Surface area Carbon) と比較的安価であること、表 2.5.3-1 に示した触媒層に関する材料目標の達成に向けて、高活性触媒や高酸素透過性アイオノマ、触媒利用率向上のための MPC 担体の適用などによる材料コストアップも想定されることから、ここでは DOE と同等のコストを目安とした。

また、表 2.5.5-1 に DOE の FCV のコスト試算結果[2]から算出された主要部材別のコスト内訳を併記しているが、触媒層、電解質膜、GDL については HDV としての耐久性確保のために FCV と比べて相対的に高いコストが想定される。セパレータについては、DOE の前提材料が含浸樹脂カーボン製のセパレータであるため FCV よりやや厳しい値となっているが、ここでは高耐食性、低接触抵抗のための表面コーティングを施した金属セパレータを前提として FCV と同等のコストを目安とした。



【技術進展①：材料・部品使用量の低減】

- Catalyst Application : Pt 量は 0.909g/kW (目付量 0.4mg/cm², 出力密度 440mW/cm²) から 0.326g/kW (0.3mg/cm², 921mW/cm²) に低減、担体・アイオノマ担持量も Pt 量に比例して低減(▲64%)
- Membrane : 安価な補強材の採用と膜厚減少で\$4/kW との試算の前提があるが、高温・耐久性向上のための材料コストアップを想定し、ここでは出力密度向上代だけ使用面積が減少することを想定 (▲52%)
- GDL : 出力密度向上代だけ使用面積が減少することを想定 (▲52%)
- Bipolar Plate/MEA Gasket : 出力密度向上代だけセル枚数が減少することを想定 (▲30%)
- CVM : セル電圧センサーあたりのセル数増加 (2 倍) で半減 (▲50%)
- Balance of Stack : スタック数減少 (4 スタックから 2 スタック) で半減 (▲50%)
- Contingency : 不測のコストは全体の 5%程度に低減

【技術進展②：低コスト材料の適用や大量生産プロセス技術の確立】

図 2.5.5-1 DOE のスタックコスト内訳と前提条件 (年産 10 万ユニット前提) [1]

表 2.5.5-1 スタック主要部材のコスト目安

主要材料	NEDO 2030 年頃		DOE 2030 内訳比率		材料コストの考え方
	HDV※1	FCV※2 (参考)	HDV	FCV (参考)※3	
触媒層	約 30,000 円/m ²	約 12,000 円/m ²	21.5 \$/kW	7.8 \$/kW	2030 年頃における HDV 用 FC の Pt 量の目標値(0.19g/kW)が DOE (0.326g/kW)と比べて少ないため、更なる低いコスト目標設定も考えられるが、高活性触媒、高酸素透過性アイオノマ、MPC 担体の採用等によるコストアップを想定して DOE と同等レベルに設定
電解質膜	約 4,000 円/m ²	約 1,600 円/m ²	4.8 \$/KW	1.7 \$/KW	耐久性確保のために FCV のコストレベルに比べて上昇
GDL	約 2,000 円/m ²	約 1,800 円/m ²	1.4 \$/kW	1.1 \$/kW	耐久性確保のために FCV のコストレベルに比べてやや上昇
セパレータ	約 120 円/枚	約 120 円/枚	4.9 \$/kW	5.3 \$/kW	DOE の HDV ではカーボンセパレータを前提しており、金属セパレータの FCV と比べて安価(約 100 円/枚)、ここでは FCV と同等レベルに設定

※1 : DOE 2030 の HDV スタック構成材料の内訳比率のデータをもとに、1 スタックあたりの出力 114kW、アクティブエリア面積 273cm²、セル数 330 枚を前提として試算

※2 : DOE 2030 の FCV スタック構成材料の内訳比率のデータをもとに、1 スタックあたりの出力 128kW、アクティブエリア面積 273cm²、セル数 330 枚を前提として試算

※3 : DOE の FCV スタックコスト (\$19/kW) および構成材料の内訳比率から算出 (年産 50 万台前提) [2]

(参考文献)

[1] “Fuel Cell System Analysis”, DOE Annual Merit Review and Peer Evaluation Meeting 2021, Project ID# FC163

[2] “Fuel Cell System Cost - 2017”, DOE Hydrogen and Fuel Cells Program Record #17007

2.5.6 材料評価の考え方

MEA、セルに用いる材料の耐久性能については、実際の耐久時間まで走行して性能確認を行い、材料開発を進めることは時間的制約、必要な手間を考えると不可能であるため実際の耐久走行に相当する加速劣化試験条件を設定して性能確認を行うことが必要となる。

加速劣化試験法に関しても乗用車向けに下記の加速耐久手法が決められている。こちらの詳細の耐久手法についても「NEDO PEFC セル評価解析プロトコル」に詳細がまとめられている。

表 2.5.6-1 材料特性の測定方法

部位	評価手法
電解質膜	M-9(Ⅲ-3-1)高電位(OCV)保持試験方法
	M-11(Ⅲ-1-8)電解質膜の膨潤耐性評価方法(湿度サイクル試験)
電極触媒・電極触媒層	C-8(Ⅲ-3-3)電位サイクル(起動停止)試験方法
	C-9(Ⅲ-3-2)電位サイクル(負荷応答)試験方法
	C-10 水素欠乏に対する触媒耐性評価(アノード電位変動耐久) ※1
	C-11 水素欠乏に対する触媒耐性評価(水電解耐久) ※1

※1：現在、測定手法について検討中、今後、追加予定。

ここで記載されている内容も評価手法と同様に乗用車向け以外には、想定される耐久条件が異なってくるため、温度や加湿条件等を商用車向けに見直しを行い、設定を行う必要がある。

商用車向けの加速劣化試験条件の設定は以下の図 2.5.6-1 に示す手順で行う。

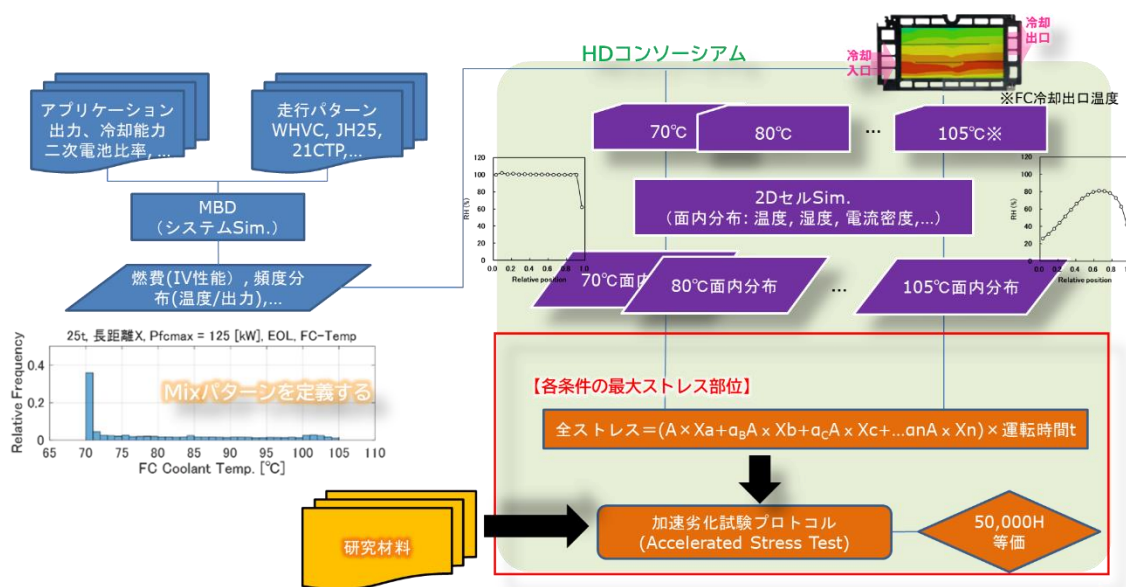


図 2.5.6-1 加速劣化試験条件の決め方のフロー

まず車や車以外のアプリケーションでの FC システムがどのような運転環境で使われるかの把握を行う。各アプリケーションでの FC の運転環境は、「2.2 要求 I-V 特性の検討」で説明されているように各アプリケーションでの要求性能等を満足する FC システムを想定し、そのシステムで各アプリケーションの運転モード条件での MBD シミュレーションを行うことにより推定でき

る。MEA、セルに用いる材料がそれぞれの運転環境にさらされる耐久時間の分布状態を示した温度環境が下図になる。

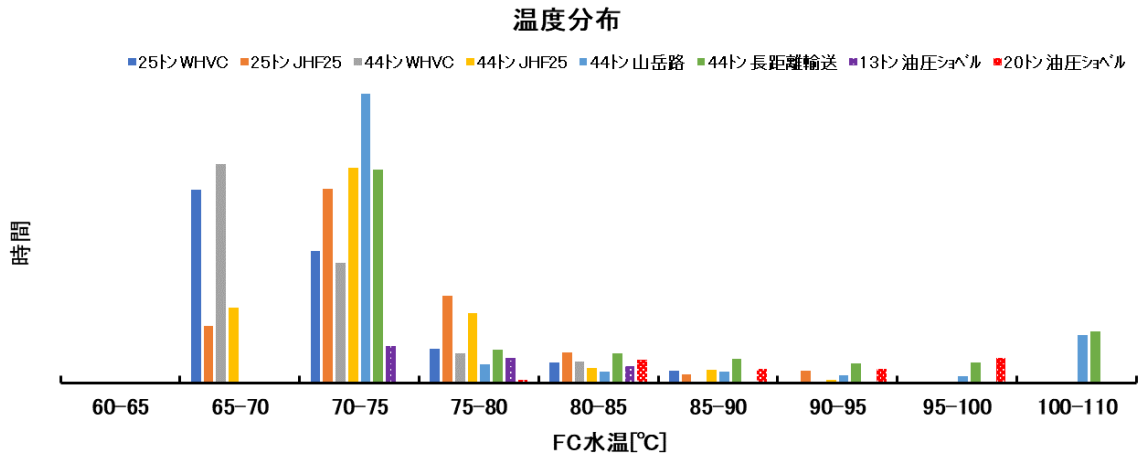


図 2.5.6-2 MBD シミュレーションから推定される FC システムの運転環境

湿度環境、電圧等の他の環境条件についても同様に耐久時間の分布状態として示すことができ、各アプリケーションで想定される FC システムの運転環境が推定できる。次に、求められた FC システムの運転環境の結果から、「2.5.4 現状の課題と目標達成に向けた開発の方向性」の項で示したようにシミュレーション (2D-Sim.) を用いて FC セル面内でのそれぞれの位置での運転環境を推定することができ、セル面内での運転環境分布を求められる (図 2.5.4-1)。

各アプリケーションでの耐久性能劣化は、性能劣化因子 (ストレス) について、セル面内での個々の運転環境でのストレスを要求される耐久時間分 (例えば大型トラックでは 50,000 時間)、積み上げた全ストレス (式①) が加わったことによる性能劣化として見積れる。

$$\text{全ストレス} = (A \times X_a + \alpha_b \times X_b + \alpha_c \times X_c + \dots + \alpha_n \times X_n) \times \text{運転時間} \quad \text{①}$$

$X_a, X_b, X_c, \dots, X_n$: それぞれの運転条件の頻度

$\alpha_b, \alpha_c, \dots, \alpha_n$: 標準運転条件 (式①の場合はA条件) に対する劣化係数

種々の運転環境において実際に MEA、セルに用いる材料がどの程度ストレスが加わり性能劣化するかは、小型単セルを用いて種々の運転条件で耐久実験を行いデータ取得することにより求める。それぞれの運転条件によるストレスは基準の標準運転条件に対する劣化係数を用いて表示できる。この実際に小型単セルで求めた実測のストレス量 (あるいは劣化係数×標準条件でのストレス量) とシミュレーションで推定される個々の運転環境の頻度データを掛け合わせ、さらに要求される耐久の運転時間を掛けて実際の耐久時間後の FC の性能劣化の推定を行うことができる。推定される性能劣化が要求される耐久後の性能を満たしていれば、耐久性能を満足することになり、この耐久性能を満足するときの全ストレス量が劣化量のクライテリアとなる。このクライテリアは、実際の使用条件で要求される耐久時間で要求性能を満足できる劣化状態以下となる必要があり、実際に市場で適用されている FC で要求耐久時間相当の劣化試料でのストレスを求める

ことで得ることが可能である。加速劣化試験のクライテリアもこの実際の使用条件で要求されるストレスに対するクライテリアと同じ値を用いることになる。

加速劣化試験条件としては、劣化係数が高くかつ実験条件として安定的に実施可能な運転条件となる条件を選定し、耐久時間はこの加速条件によりストレス量がクライテリアに達するまでの時間として決めることになる。

電解質膜のストレス量としては分子量低下率を指標として、影響する因子としては温度、加湿条件、電流密度等になる。電極触媒のストレス量としては ECSA が指標として考えられ、影響する因子としては温度、電位変動幅、加湿条件等になる。今後、これらの因子等を振ってデータ蓄積を行い、加速耐久条件の選定を進めていく必要がある。

【評価の実例】

・性能耐久評価

前述の考え方を基に、出力性能の耐久評価を行った例を以下に示す。

トヨタ自動車第一世代 MIRAI の MEA をモデルとして検証を実施。同仕様の MEA による負荷応答サイクル試験 (NEDO PEFC セル評価解析プロトコル C-9 III-3-2) [1]の試験結果、及び 20 万 km 実走テスト終了後の MEA 解析より得られた電気化学的表面积 (以下 ECSA) の値を図 2.5.6-3 に示す。

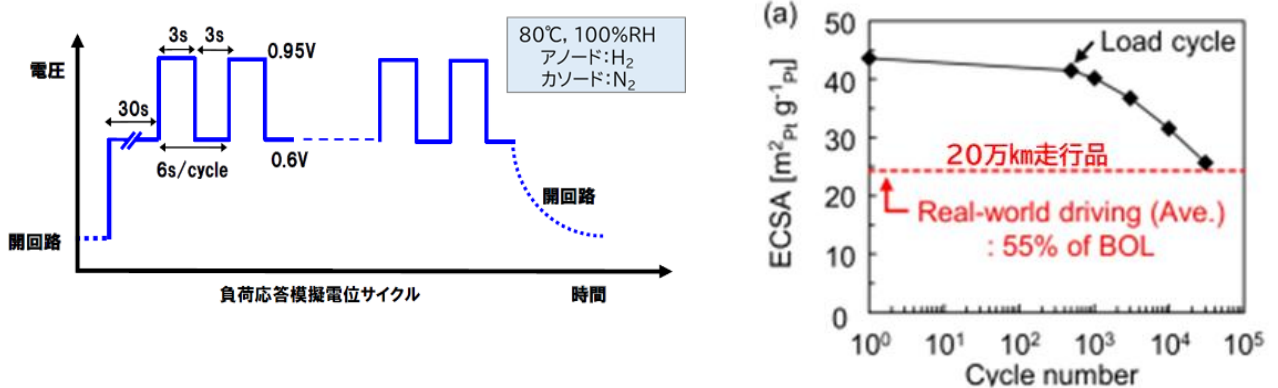


図 2.5.6-3 負荷応答サイクル試験と 20 万 km 実走行後の ECSA の関係

第一世代 MIRAI の MEA については不可逆的な劣化として空気極触媒の面積比活性の低下は小さく、ECSA 低下による質量活性の低下が主要因であることが示されている [2]。

2030 年頃の目標 I-V 特性導出には、触媒劣化による I-V 特性低下を予測するシミュレーション [3]が用いられている。本シミュレーションから、材料の耐久目標となる EOL での ECSA と、負荷応答サイクル試験によるサイクル数を推定する。本計算で用いる触媒劣化モデルについては、現物との整合性を第一世代 MIRAI での 20 万 km 実走テスト終了後の ECSA 測定値と

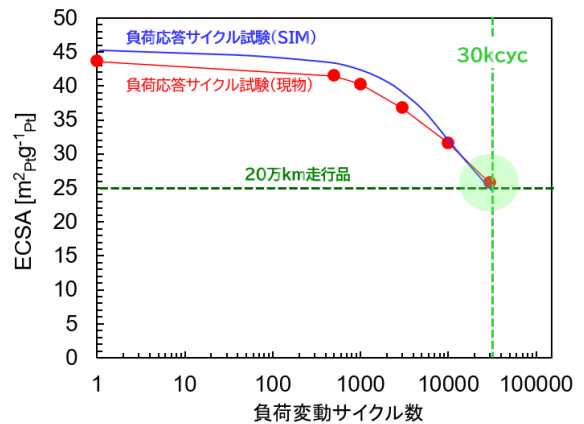


図 2.5.6-4 シミュレーションの検証結果

同一ストレスを用いたシミュレーションによる ECSA 推定値が概ね整合することで確認している。更に、負荷応答サイクル試験でも評価結果とシミュレーション推定値の整合性を図 2.5.6-4 に示す通り確認した。

このシミュレーションを用い 2030 年頃の HDT の耐久条件である WHVC+起動停止モード 5 万時間走行後の I-V 特性に対応する ECSA と、同一 ECSA になるまでの負荷応答サイクル試験によるサイクル数を求めた。結果を図 2.5.6-5 に示す。

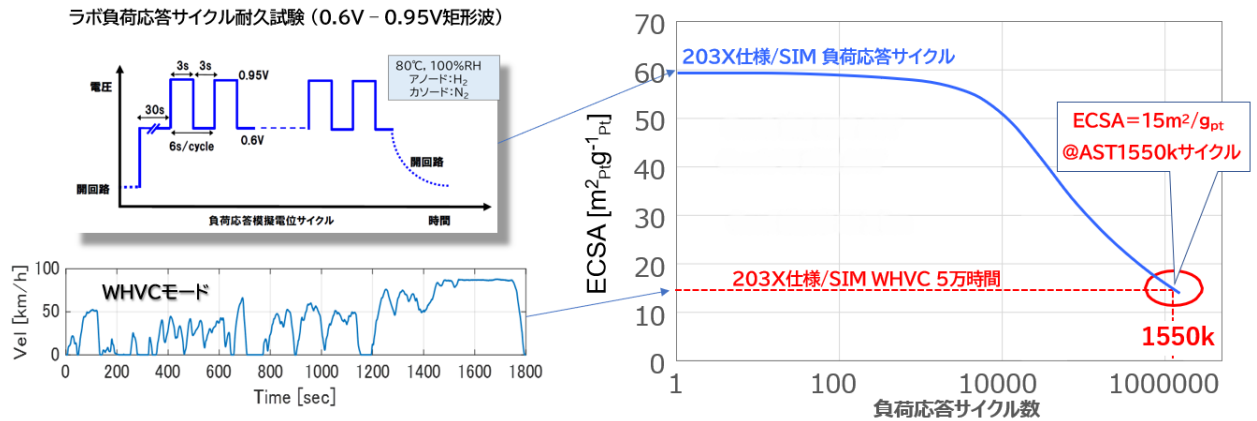


図 2.5.6-5 2030 年頃の目標に対する負荷応答サイクル回数と ECSA の設定値

この結果から、2030 年頃の目標 I-V 特性を満たすために必要な触媒耐久目標は、「表 2.5.3-1 に示される主要材料の初期物性に対して、負荷応答サイクル試験条件で 1,550k サイクル後、ECSA $15\text{m}^2\text{Ptg}^{-1}\text{Pt}$ 以上を満たすこと」と求められた。なお、ECSA が $15\text{m}^2\text{Ptg}^{-1}\text{Pt}$ と比較的低い値で 2030 年頃の I-V 特性の要件を満たしていることは、2030 年頃の目標設定では高酸素透過性アイオノマの適用を前提としており、従来材 (Nafion 等) に比べて ECSA 低下による高電流密度での I-V 特性低下 (ガス拡散抵抗増加) が抑制されることが挙げられる。また、また、表 2.5.3-1 に示される通り GDL・流路のガス拡散抵抗目標から得られる低減効果大きいことも挙げられる。

以上から、性能耐久における評価として負荷応答サイクルを適用することは有効であり、2030 年頃の I-V 目標に対してはサイクル数 1,550k サイクル、ECSA の下限としては $15\text{m}^2\text{Ptg}^{-1}\text{Pt}$ を目標として評価を行うことで材料、MEA 仕様としての評価を行うことが可能である。

・電解質膜耐久評価

電解質膜の耐リーク性に対する評価としては、電解質膜を構成する高分子材料の分子量低下を指標とした評価手法を検討中であるが、劣化因子と定量性について更なる検討が必要であるため、本年度の解説書には記載せず、次期以降も継続して検討し追記する。

(参考文献)

- [1] 国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO)
「NEDO PEFC セル評価解析プロトコル 2022 年 3 月版」
- [2] S. Katayama, “Analysis of MEA Degradation through FCV Real-World Driving Test”, The 63rd Battery Symposium in Japan, Fukuoka, Japan, Nov. 2022,
(The Committee of Battery Technology,) The Electrochemical Society of Japan.
- [3] T. Watanabe, M. Shibata, N. Fukaya, T. Nagai, T. Suzuki, Setting Development Targets for Fuel Cells and Systems for Heavy-Duty Trucks Using a Comprehensive Model-Based Approach, 242nd ECS Meeting, MA2022-02, 1468 (2022)

2.6 FC 材料目標（技術革新による 2040 年頃までの達成シナリオ）

2.6.1 40 年目標達成に向けた考え方

2030 年目標と同様に MBD シミュレーションにより、2040 年の FC システム性能を成立させるのに必要な BOL および EOL の I-V 特性が提示された。この目標値は、HDV における燃料電池アプリケーションとして最も FC スタックへの要求性能が厳しい 44 トンクラスの大型トラックを対象とし、2 次電池（BEV）や水素エンジンと比較して商材としての優位性を示す性能目標として、現在の PEFC の Pt 触媒系のシステムでは、現行の延長線上の改良だけで到達困難なレベルと想定される。そのため、2.5 節で説明した、現行技術の高度化による性能向上を目指す 2030 年頃までの PEFC 技術開発に比べて、2040 年以降の目標達成へのシナリオは、現行技術の延長線上にはない不連続な性能向上を必要とし、その時期や程度を正確に予測できるものではない。

ここでは、2040 年の BOL の目標 I-V を成立させるのに必要な初期材料物性を検討し、各材料物性および耐久性を両立させるための材料開発の方向性（特に触媒、電解質材料）については、個別の物質・材料種にフォーカスせず、それぞれの材料のポテンシャルの科学的な理解を軸に分類して、学理で成り立つ可能性のシナリオを検討し、将来の研究ニーズとして整理した。

さらに、こうした材料開発においては、現状技術の限界を打破するための基礎研究（新学理・革新コンセプトの創出）が重要となる。高度な解析、計算科学技術による現象・機構解明にもとづき材料設計の指針を提示するとともに、これらの解析・計算データを蓄積し、DX 技術（個別要素技術は 2.9 節を参照）を活用することで、従来型の試行錯誤による開発手法を打破し、科学的かつ効率的に材料・プロセスの探索を行うことができる。さらに、その過程で創生された材料候補の実測データをフィードバックすることで、目標達成へ向けた開発サイクルを加速していくことができる。

本節では、2040 年目標達成のシナリオとして、2.5 節と同様に 2040 年頃の要求 I-V 特性を満たす材料初期物性をシミュレーションにより検討し、それらの目標を達成しうる検討材料開発の方向性に加えて、材料・プロセス探索加速のための DX 技術、機構・現象解明（解析・計算科学）、およびこれらの研究推進に必要不可欠な人材育成の在り方も検討し、以降にまとめた。なお、今後も最新動向や解析・計算データ等の収集を並行して進め、シナリオの仮説・検証を継続的に検討していく方針である。

2.6.2 要求 I-V 特性を満たすための材料初期物性の検討

2030 年頃の要求 I-V 特性の場合と同様に、2040 年頃の要求 I-V 特性を満たす材料初期物性をシミュレーションにより検討する。シミュレーションは 2.5.2 項と同様に、燃料である水素を空気中の酸素で酸化して水を生成する電気化学プロセスにより発電する固体高分子形燃料電池を想定したものである。既存のシミュレータを活用した材料初期物性の試算であるため、現行の Pt 触媒、プロトン伝導型の電解質膜を想定したシミュレーションとなる。しかし算出される活性、イオン伝導率に関しては、非 Pt 触媒やアルカリ型電解質の目標値にも転用できるものとする。製品・システムの検討から提示された要求 I-V 特性には、2030 年と同様の冷却水出口温度 105°Cでの運転を前提とするものと、120°Cを前提とするものがある。前者では、小さな外気温との温度差で FC を冷却できるよう、極めて高い発電効率が要求されている。これを実現する触媒活性は、Tafel 勾配を Pt 触媒が示す 70 mVdecade^{-1} と仮定すると、現行材料の数千倍という達成し難い値となる。そこで本検討では、より現実的な物性目標を与え得る、冷却水出口温度 120°Cでの運転を検討する。要求 I-V 特性に強く影響するもう一つの因子は触媒の劣化速度である。MBD シミュレーションでは粒子径 3 nm の Pt ナノ粒子と比較して、1/100~1/30 の劣化速度が検討され、劣化速度が遅いほど、要求される初期の I-V 特性は低下するとの結果が示されている。しかし触媒活性と溶出速度とは背反関係があり、高すぎる耐久性もまた非現実的な目標を与え得る。本検討では、各種文献調査に基づき、2040 年頃には粒子径 3 nm 程度の Pt ナノ粒子の 1/30 程度まで溶出速度の低減を期待できるとし[1]、この前提に基づく要求 I-V 特性を材料初期物性の検討対象とした。

図 2.6.2-1 に想定するシステム構成および運転条件を示す。図 2.5.2-2 に示した 2030 年頃のシステム構成および運転条件と比較すると、運転温度の高温化に加え、空気極入口の湿度が 20%RH から 12%RH に低下、電極面積が 273 cm^2 から 293 cm^2 に増加、動作点電流密度が 2.0 Acm^{-2} から 2.3 Acm^{-2} に増加している。湿度の低下は高温化に伴うものであり、電極面積の増加は FC スタック 2 基でより高い出力が要求されていることを反映したものである。動作点電流密度 2.3 Acm^{-2} は MBD より提示された動力性能要件における電流密度に相当し、この点での電圧を満たすか否かを、材料物性が要求性能を満たすか否かの判定条件とした。この判定は、動力性能要件において FC を冷却できるか否かが要求 I-V 特性を決定づけるとの背景に基づいている。なお図 2.2.3-4 に示すとおり、FC は、高温運転条件で常に動作する訳ではなく、WHVC や JH25 の走行パターンでは、その多くの動作温度は 70°C 付近である。すなわちここで検討する条件は、初期材料物性を決定づける条件ではあるが、主要な運転条件ではない。

シミュレーションに用いる物質輸送・電極反応のモデルは、2.5.2 で説明したものとほぼ同じであるが、電解質のプロトン伝導率のみ、(2.5.1)式の含水率依存性を加味するモデルから、含水率に依存しない定数値へと変更した。これは、120°Cの高温・低湿運転でのプロトン伝導挙動を考慮するモデルがないことに加え、2040 年頃の高い要求 I-V を満たす電解質材料が現状のフッ素系電解質膜の延長線上にあるとは限らないとの判断に基づく。

シミュレーションにより得た I-V 特性を MBD により提示された I-V 特性や他の I-V 特性と共に図 2.6.2-2 に示す。同図には、本シミュレーションから得られた各過電圧を、2030 年頃の要求 I-V 特性を想定したシミュレーションから得た過電圧と共に示す。また参考のため、シミュレーシ

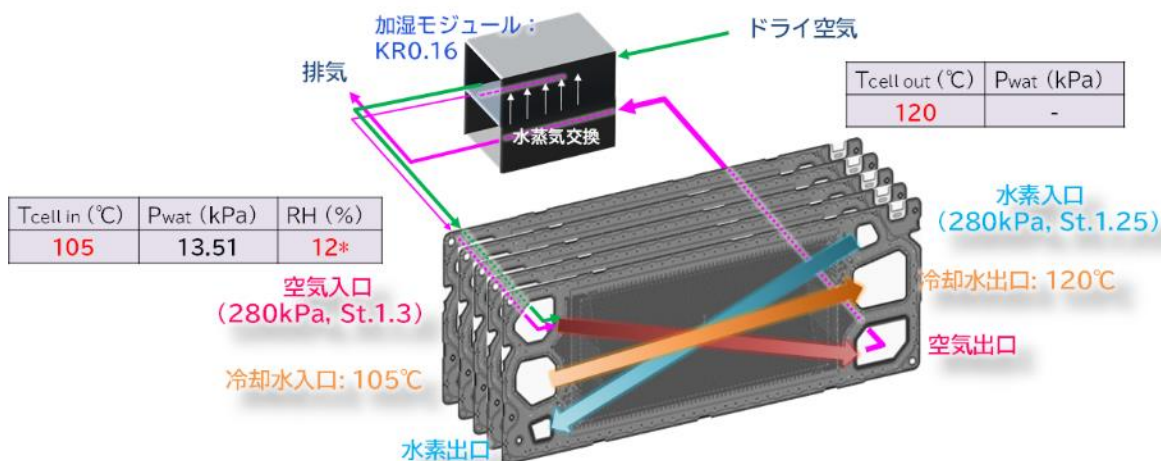
ョンに用いた材料物性の入力値を表 2.6.2-1 に示す。加えて、図 2.5.4-1 と同様に、セル内部の電流密度、相対湿度、酸素分圧、温度の分布を図 2.6.2-3 に示す。

要求 I-V 特性を満たす初期材料物性の組み合わせは無数にある。本検討では、以下の考えに基づき入力値を設定した。第一に触媒材料である。図 2.6.2-2 の 2030 年頃の想定における過電圧の内訳からも分かるとおり、活性化過電圧は最も大きく、2040 年頃の要求 I-V 特性を達成する上で、触媒は最も重要な材料と言える。普及シナリオから、Pt を触媒として使用する場合に許容される使用量は、セル面積当たり 0.14 mg cm^{-2} (0.07 gPt/kW に相当) と試算されている。ここではその内の 0.12 mg cm^{-2} をカソードに、残りの 0.02 mg cm^{-2} をアノードに利用するとの前提を置いた。なお上述の Pt 使用量よりも資源・コストのリスクがなく、後述する活性を満足できれば、材料は Pt 系触媒に限ったものではない。高温化により要求 I-V 特性が下がったとは言え、2040 年頃の要求 I-V 特性の 2.3 Acm^{-2} での電圧は 2030 年頃のそれよりも 150 mV 程度高く、これを触媒活性の向上のみで実現するとの前提に立つと、現行材料の 500 倍の活性を要するとの達成困難な試算結果を得る。これを実現する不連続的な新材料の進化を否定できるものではないが、材料開発のアプローチを多様化するという観点で、現行の Pt 系触媒材料の進化形でも目標を達成する道筋があることが望ましい。本検討では、各種文献調査に基づき、Pt 系触媒が従うとされる Volcano plot の頂点に位置する $\text{Pt}_3\text{Ni}(111)$ 単結晶表面の比活性 18 mAcm^{-2} (0.9 V vs. RHE 、室温、 0.1 M HClO_4 溶液、RDE 試験結果) [2] を、究極的に高い比表面積 ($200 \text{ m}^2\text{g}^{-1}$) を持つ単原子層触媒で達成するとして、質量活性 $34,000\text{-}42,500 \text{ Ag}^{-1}$ (温度に依存) をシミュレーションの入力値とした。しかしこのような究極とも言える Pt 系触媒をもってしても、他の部材の物性を表 2.5.3-1 に示す 2030 年頃の値に据え置くと、要求 I-V 特性が示す 2.3 Acm^{-2} での電圧を満足しない。よって抵抗過電圧や濃度過電圧も減少する必要がある。これらの内、2030 年頃の要求 I-V 特性における濃度過電圧に関しては、その大半が、限られたストイキ比によるカソード流路下流での酸素分圧低下に由来しており、流路・GDL・触媒層要素材料の物質輸送特性の向上による I-V 特性の改善の余地は少ないことがシミュレーションによる検討により判明した。よって本検討では、電解質のプロトン抵抗と電極の電子抵抗とに取り分があると考えた。電解質膜に関しては、その厚さを 2030 年頃の $8 \mu\text{m}$ から $1 \mu\text{m}$ へと薄膜化し、かつプロトン伝導率を温度 $55\sim 125^\circ\text{C}$ 、湿度 $12\% \text{RH}$ 以上で 0.15 S cm^{-1} を満たすとの前提を置いた。プロトン伝導率に関しては、 40°C 以上でプロトン伝導性を示すリン酸のプロトン伝導率 0.15 S cm^{-1} [3,4] を参考値とした。なお当然のことながら、リン酸のように触媒を被毒する電解質であってはならない。上限温度に関しては、動力性能要件において、電解質の温度が冷却水出口温度 120°C よりも 3°C 上がるとの図 2.6.2-3 に示すシミュレーション結果を加味し、シミュレーションの誤差を考慮して 2°C のマージンを考慮して設定したものであり、下限温度に関しては、先述の通常走行時 (冷却水出口温度 70°C 付近、図 2.2.3-4 参照) での燃費を担保することを念頭に、この条件での空気極入口温度 55°C と想定して設定したものである。なおさらなる低温領域でのプロトン伝導率に関しては、起動システムとの兼ね合いで要求値が変動し得るもので、今後の検討課題と考える。湿度に関しては、図 2.6.2-3 の湿度分布から、湿度が空気極入口の 12% を下回らないことに基づき設定した。また界面電子抵抗をセル全体で $0.4 \times 10^{-8} \Omega \text{m}^{-2}$ とした。また薄膜化しても商用において求められる長い耐久性を担保しなければならないことも注記しておく。湿度条件は、後述するセル内の湿度に関するシミュレーション結果が空気極入口での相対湿度 $12\% \text{RH}$ を下回らないことを確認して設定した。界面電子抵

抗は、セパレータ・GDL等の界面を溶接する等して接合することを前提としている。なおこれらの材料物性値の達成手段は、触媒の場合と同様に、ここに記載する方法に限るものではない。また2030年頃を起点とした場合、流路・GDL、触媒層の濃度過電圧に改善の余地が少ないと述べたが、このことは濃度過電圧に関わる研究開発の重要性を否定するものではないことも強調しておく。プロトン伝導率や触媒活性の格段に高い電解質や触媒が開発されたとしても、これらを組み合わせてセルを構成した際に物質輸送が律速となり所望の出力を得られないことは十分に起こり得る。新素材の持つ性能を最大化する、あるいはあるべきプロトン・ガス輸送経路や活性点密度を予測して要素を設計する上で、これらの研究は重要であり続けると考えられる。

(参考文献)

- [1] Lopes et al. *Nature Mater.* **19** 1207 (2020).
- [2] Stamenkovic et al. *Science* **315** 493 (2007).
- [3] Greenwood et al. *J. Chem. Soc.* 3485 (1959).
- [4] Aihara et al., *J. Phys. Chem. B* **110** 24999 (2006).
- [5] H. Yano, E. Higuchi, H. Uchida, and M. Watanabe *J. Phys. Chem. B* **110** 16544-16549 (2006).
- [6] Z. Zhu, Q. Liu, X. Liu, and J. Shui *J. Phys. Chem. C* **124** 3069-3079 (2020).



連続定格点 (120°C運転条件) / 水素循環あり			
電極面積	293 cm ²	Air 入圧 / 出圧	280 / 250 KPa
動作点電流	2.3A cm ⁻²	加湿モジュール出圧	240 KPa
H ₂ ストイキ比	1.25	水蒸気交換量	16 %
Air ストイキ比	1.30	セル入口冷却水温度	105 °C
H ₂ 入圧 / 出圧	280 / 250 KPa	セル出口冷却水温度	120 °C

図 2.6.2-1 想定するシステム構成および運転条件

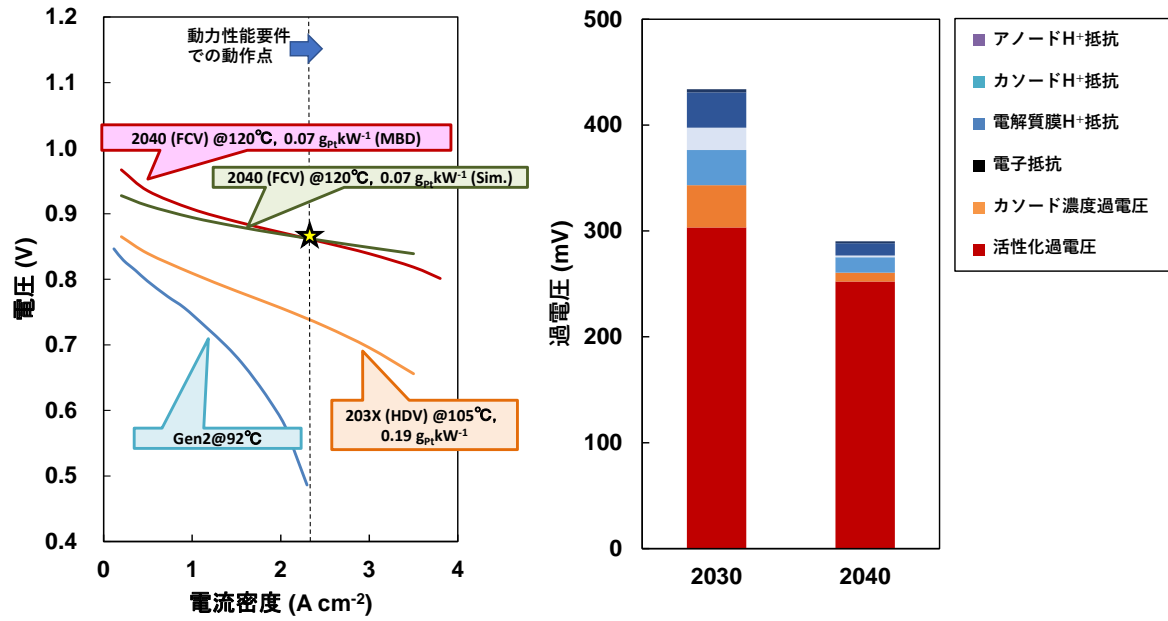


図 2.6.2-2 要求される初期 I-V 特性の 2D-Sim.結果(緑の実線)と過電圧内訳

左図には Gen2 MIRAI の初期 I-V 特性(青)、2030 年頃に要求される初期 I-V 特性(オレンジ)、MBD により試算された 2040 年ごろに要求される初期 I-V 特性(赤)を、右図には 2030 年頃と 2040 年頃の I-V 特性における過電圧内訳のシミュレーション結果を示す

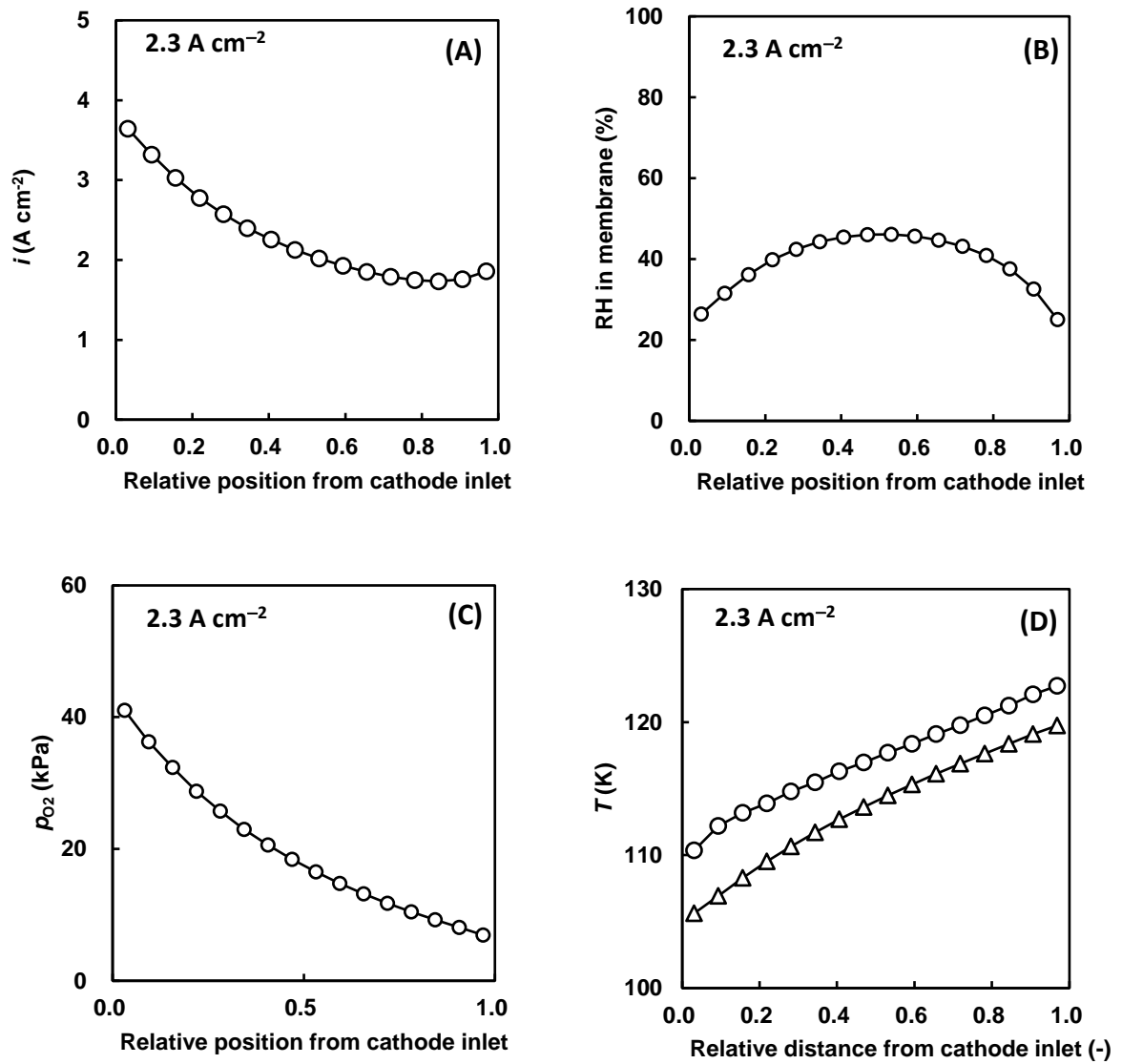


図 2.6.2-3 連続定格点運転 (図 2.5.2-2 の 2D-Sim. 電流電圧曲線) における FC セル面内の (A)電流密度分布、(B)相対湿度分布、(C)酸素分圧分布、(D)温度分布、図中 Δ は冷却水温度、 \circ は電解質膜面温度

表 2.6.2-1 2040 年頃の要求 I-V 特性を想定した 2D-Sim. で設定した物性値

要素	物性	物性値 (目標値)	備考
電解質膜	H ⁺ 伝導率@55-125°C, 12%RH	0.15 S cm ⁻¹	厚さ 1 μm の電解質膜を想定し、プロトン伝導率は湿度に依存しないモデルを利用。計算においてラジカルクエンチ剤による伝導率の低下は加味していない。2D-Sim. は動力性能要件に相当する高温(冷却水出口温度 120°C)を前提としているが、大半の運転温度は、通常運転での冷却水出口温度 70°C 付近である、これを念頭に、燃費確保の観点で、下限温度をこの条件での空気極入口温度 55°C を想定する。なおさらなる低温での設定値に関しては、今後の検討課題とする。
空気極触媒層	Pt 目付量	0.12 mg cm ⁻²	Pt 単原子層を想定した比表面積。
	ECSA	200 m ² g ⁻¹	
	質量活性@120°C, 100%RH, O ₂ 分圧 100 kPa _{abs} , 0.9 V	42,500 A g ⁻¹	電解液中の溶存酸素濃度変化を補正した速度定数の活性化エネルギーの実測値 (38 kJ mol ⁻¹) [5]と電解質への酸素溶解度[6]を用い、気相中の酸素を基準として算出した活性化エネルギー 17 kJ mol ⁻¹ を使用。
	質量活性@25°C, 100%RH, O ₂ 分圧 100 kPa _{abs} , 0.9 V	34,000 A g ⁻¹	
	アイオノマ H ⁺ 伝導率 @55-125°C, 12%RH	0.15 S cm ⁻¹	電解質膜と同様に、プロトン伝導率は湿度に依存しないと仮定。触媒層中のアイオノマの有効プロトン伝導率 κ_i^{eff} は体積分率/屈曲率=1/5 として計算。温度・湿度条件に関しても、電解質膜と同様の考えに基づく。
	電子伝導率	2.0 S cm ⁻¹	
	触媒層内 O ₂ 拡散抵抗	8 s m ⁻¹	Pt 目付量および ECSA から算出される RF より、DE2020 を想定した文献の式を HOPI の界面抵抗となるよう補正した式 $R_{int}=560/RF$ (s m ⁻¹) にて界面抵抗を定義。
	I/C	1.0	
触媒層厚さ	3.6 μm	触媒層厚さが 3.6 μm となるよう空隙率を調整。	
Pt 担持率	60 wt%		
燃料極触媒層	Pt 目付量	0.02 mg cm ⁻²	空気極と同様の前提にて試算。
	アイオノマ H ⁺ 伝導率 @55-125°C, 12%RH	0.15 S cm ⁻¹	
	電子伝導率	2.0 S cm ⁻¹	
	I/C	1.2	
	触媒層厚さ	2 μm	
Pt 担持率	20%		
空気極流路/GDL	GDL 厚さ	50 μm	2030 年頃の構成と同様に、例えば 3D ファインメッシュ等を想定し、GDL に一様にガスが行き届くと想定。ε _{GDL} =0.75, τ _{GDL} =7 と設定。分子拡散抵抗は、図 2.3.3 (C) の勾配より導出。
	分子拡散抵抗	18 s m ⁻¹	
	電子伝導率	4.9 S cm ⁻¹	
燃料極流路/GDL	GDL 厚さ	150 μm	例えば 3D ファインメッシュ等を想定し、GDL に一様にガスが行き届くと想定。
	電子伝導率	2.7 S cm ⁻¹	
セパレータ関係	接触抵抗	0.4 mΩcm ²	溶接等活用し、接触抵抗を低減することを想定。

2.6.3 主要材料の物性目標

2.6.2 項で述べた初期の目標 I-V 特性を満たすための物性パラメータを根拠に、主要材料の物性目標の項目と目標値を表 2.6.3-1 のように定めた。また、参考のため、2030 年頃の物性目標および現行材料からなる MEA での物性、特性値の実測値も併せ示した。

表 2.6.3-1 2040 年頃の主要材料の物性目標 ★は、今後測定

要素	物性	2040 年頃の目標値	2030 年頃の目標値	Gen2-MIRAI※3	一般材料
空気極触媒層	Pt 目付量 (mg cm ⁻²)	0.12	0.20	0.17	0.20
	ECSA (m ² g ⁻¹)	200	60	48	61
	質量活性@120°C, 100%RH, O ₂ 分圧 100 kPa _{abs} , 0.9 V (A g ⁻¹)	42,500	—	—	—
	質量活性@80°C, 100%RH, O ₂ 分圧 100 kPa _{abs} , 0.9 V (A g ⁻¹)	39,000	1740	500	95
	触媒層ガス拡散抵抗 (s m ⁻¹)	8	10@80°C, 80%RH	9.1@80°C, 80%RH	18.1@80°C, 80%RH
	触媒層厚さ (μm)	3.6	6.0	9.1	7.4
	アイオノマ H ⁺ 伝導率@120°C (S cm ⁻¹) ※1	0.15@12% RH	—	—	★
電解質膜	膜厚 (μm)	1	8.0	8.5	25
	H ⁺ 伝導率@120°C (S cm ⁻¹) ※1	0.15 @12%RH	0.032 @30%RH	0.018 @30%RH	0.016 @30%RH
GDL・流路・セパレータ	GDL 面積抵抗(Ωcm ²)	0.0010	0.0010	★	<0.01
	流路・GDL(分子拡散抵抗) (s/m) ※2	18	18@80°C, 80%RH	58.3@80°C, 80%RH (並行流路)	60.8@80°C, 80%RH (並行流路)
	GDL/セパ、セパ/セパ等: 接触抵抗合計 (Ωcm ²)	0.0004	0.0065	★	—

※1: 電解質膜の H⁺伝導率は、補強材込みの伝導率。クエンチャ添加など、耐久性を担保した状態での伝導率。表では 2030 年目標との対比から、120°Cでの伝導率を示しているが、55~125°Cの範囲(湿度 12%RH 以上)で、この目標を満たすものとする。上限温度に関しては、動力性能要件において、電解質の温度が冷却水出口温度 120°C よりも 3°C上がるとの図 2.6.2-3 に示すシミュレーション結果を加味し、シミュレーションの誤差を考慮して 2°C のマージンを考慮して 125°Cと設定したものであり、下限温度に関しては、先述の通常走行時(冷却水出口温度 70°C付近、図 2.2.3-4 参照)での燃費確保を念頭に、この条件での空気極入口温度を 55°Cと想定し、設定したものである。なおさらなる低温領域でのプロトン伝導率に関しては、今後の検討課題と考える。湿度に関しては、図 2.6.2-3 の湿度分布から、湿度が空気極入口の 12%を下回らないことに基づき設定した。

※2: GDL と流路の構造との組み合わせで決まる特性値。

※3 第二世代 MIRAI の MEA を用いた実測値、解析結果。(FC-Cubic 測定)

※4 触媒: 田中貴金属 TEC10V30E、カソード触媒担持量: 0.2mg-Pt/cm²、アノード触媒担持量: 0.1mg-Pt/cm²、アイオノマ: Chemours Nafion™ D2020、I/C:1.0、電解質膜: Chemours Nafion™ NR211、GDL: SGL-CARBON SIGRACET® 22BB からなる MEA で測定した値。(FC-Cubic 測定)

※5 メーカー公表値 <https://www.sglcarbon.com/en/markets-solutions/material/sigracet-fuel-cell-components/>

2.6.4 目標達成に向けた材料開発の方向性

(1) 材料開発の方向性の考え方

本ロードマップは、現行システムの着実な性能向上を目的として 2030 年頃を目標に進められる各開発とは別に、2040 年頃を目標にして飛躍的な性能向上を成し遂げる可能性の候補を現時点で示すものである。非常に高い目標値であることは疑いようがない事実であり、それを達成する可能性がある材料系の考え方を示すものであり、個々の材料を選定する意味合いはない。各材料研究者が科学的な根拠を示しながら、新たな候補を含めて選択肢が洗練されていくことが望ましい。

まず、大きな性能向上を成し遂げるために着目すべき幹となる材料系について整理を行う。前項までに記載した過電圧分離と主要物性目標から、材料開発の方向性の基本的な考え方について記載する。繰り返しになるが、要求 I-V 特性を満たすための物性は現状の材料特性と性能向上速度を考えると、外挿直線上に無い非常に高い目標値と言える。発電特性の伸びしろという観点では、カソード触媒の取り分が大きく、全過電圧の中で圧倒的なロスの原因であることが示された (図 2.6.2-2)。

カソード触媒の性能は 2006 年～2016 年にかけて 10 年で 100mV 程度のペースでの過電圧低減が報告されていたが、その速度は鈍化して頭打ちになってきている (図 2.6.4-1)。最近、この頭打ちを脱したという報告例もあるものの、その回避策が明確ではない 2023 年初頭の現時点では、カソード触媒の活性のみにデバイス性能の向上を求めることはリスクが高いと考えられる。このような前提で、システム全体としてのバランスを見直し、前項に記載のようにデバイスの作動環境を調整することで他の材料へも一定の要求を分散させている。

その作動環境の調整として、発電温度の上昇が 1 つの方針であり、触媒活性への非常に高い要求を低減できると期待できる。反応促進という面だけではなく、水の沸点を超えた低湿度での作動が想定されるため、液水が関係する現象について大きく変化する。例えば触媒表面での水の脱離現象やプロトン溶媒和が大きく変化する。イオン伝導体の開発にはメカニズムの観点からも整理をすることが望ましい。このような前提では、電解質膜の開発もカソード触媒と同等の重要性を有しており、ここでは、カソード触媒と電解質膜の 2 つが目標値を達成するための最重要材料として扱う。

これら最重要材料を含む各部材の有機的な連携で性能を発揮する燃料電池においてはガス拡散電極などの他の部材や、MEA の構造なども大切な検討項目であることは疑いようがない事実である。しかし、研究開発の流れを考えると、触媒や電解質膜の開発に強く依存するものであるため、これらの部材については特定の材料ではなく、開発を促進する共通基盤技術をまずは醸成すべきと考えられる。例えば、触媒層の計測・解析技術、シミュレーション技術や最適化技術は、新奇な触媒材料を製品へ迅速に繋げるために重要な共通技術であり益々重要になっていくと考えられる。

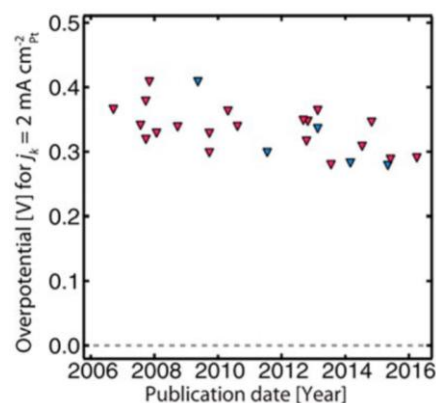


図 2.6.4-1 カソード触媒の開発と過電圧の推移

Kulkarni, A., Siahrostami, S., Patel, A., & Nørskov, J. K. (2018). Understanding Catalytic Activity Trends in the Oxygen Reduction Reaction. In *Chemical Reviews* (Vol. 118, Issue 5, pp. 2302–2312).

(2) 材料開発の加速手段や取り組み方法

研究開発において、知的好奇心に基づく研究（キュリオシティ・ドリブン型）と出口を目指した目的志向型研究の大別ができるが、燃料電池研究は基本的には後者である。その活動の中で、前者の取り組みも否定はすべきではないが、産業に繋げるロードマップという性質上、想定できる骨子は目的志向型研究を強く意識すべきである。一方で、長期的な視点でブレークスルーが必要であるため、基礎研究についても涵養する環境も必要である。

前項に記載したように、これまでの技術推移の延長線では到達が容易ではない目標を限られた時間と予算で達成する必要がある。それゆえに、個々の活動だけではなく、国内の開発が加速可能な基盤技術や共通基盤の整備が益々と重要になる。現在、様々な分野で DX の波が押し寄せており、社会的・技術的な変革が起こりつつある。研究開発の分野でも、自動化を超えた自律化や高速計算などデジタル空間の有効利用が次々と提案されてきており、例えば創薬の分野での競争が著しい[1-3]。触媒材料にもその展開が検討されてきており、協働ロボットが人間の代わりに実験を行う研究が提案され、無人実験という注目すべき大きな流れとなっている[4]。

このような技術革新が進む中で、研究計画の考え方も変えるのが自然である。敢えて馴染みのない言い回しで書くと、今後の研究開発においては、これまでは境界を意識してこなかったパラメータ空間の端までを意識した探索が主軸となると考えられる。平たく言えば、検討するパラメータを研究者の直感や経験のみに頼った選択ではなく、データ科学などに基づいて科学的に効率的に探索することが求められる。可能な全ての探索の組み合わせを分母に取り、研究期間で検討可能な数に分子を取った探索範囲の割合を意識した計画が必須である。効率化・加速化は探索数（分子）の増加や探索範囲（分母）の効率的な絞り込みといった視点で整理できる。各材料系によって、どのようなアプローチで加速化ができるかを意識しつつ、可能な全ての組み合わせの中から最適な解を導くための手法が必要である。

例えば、複数の検討パラメータを探索する必要がある複雑な材料系では、検討パラメータが爆発的に増えてしまい、宝探しのようになるがちである。組成、処理温度、酸処理の3つを各10点について検討するだけでも1,000通りの場合の数があるわけである。このような材料を2つ用いるハイブリッド材料ともなれば、百万通りを超える場合の数が生じるため、全体を見ると散発的な検討しか既存の検討の方法では難しい。それを解決するために、計算科学などによるスクリーニング技術[5]や、マテリアルズ・インフォマティクス (MI) による探索の支援技術[6]、高速実験技術による検討数の飛躍的な増加[7-11]が必要である。さらに、限られた時間の中で検討数を飛躍的に増やすための自動計測・解析技術が必須であり、その開発との連携を適切な時期に可能にすることも今後の鍵と言える。

このように材料開発に大きな変化が必要であることは疑いようがない事実であり、研究開発の連続性の中でも、人材という観点では、早めに国内に情報共有をし、教育環境を整える必要がある。2023年現在で、先を見据えた材料開発の方向性を示すことは、それぞれの研究での知見を中長期的な視点で研究開発を行う上で重要な意味を持ち、特に今後の研究開発を先導するような若手の研究者の挑戦を後押しすることに繋がると期待する。

次項以降に各材料についての目標設定の考え方の詳細を記載し、カテゴリーに分けて材料研究の可能性を記述し、闇雲な宝探しに終始しないよう、戦略的にその可能性を高めるための基盤技術や考え方の例を示す。

ついても、研究開発の時間的コストの管理がこれまで以上に必要であり、本項(2)で記載したような加速する基盤が必要と考えられる。

① 現行原理の極限の貴金属触媒の開発

貴金属結晶表面を用いた現行原理の触媒は、歴史も長く、近年は計算化学、高度計測、合成の3つの柱が成熟してきており、科学的な理解を伴った開発が進められている[16]。現行原理内での最高の質量活性は、理想的なPt触媒表面を単原子層で実現することである。つまり、Pt単原子層を形成して十分な比表面積を確保しつつ、適切な結晶歪を付与することでボルケーノプロットの頂点を得ることである。最近では、Ptと遷移金属との規則化合金におけるPt-Pt距離の変化を利用した触媒の研究が盛んに行われている[17-20]。前項2.6.2の予測において、全てが理想的に得られた場合には、システム要求を満たす目標値に近くなる(2.6.3項記載参照、約68倍の質量活性 vs 第二世代MIRAI)。

この現行のPt材料の更なる進化でスケーリング則を脱するという方向性は、国内の現有設備や研究者の経験や知識の連続性という観点からも最も自然な検討内容である。例えば、図2.6.4-2bの考え方に沿って言えば、現在も検討が進められているPt触媒の電解質側の修飾で電気二重層や表面の吸着構造を変化させることで[21-24]、現行原理の限界を超える余地がある。

② ハイブリッド材料によるヘテロ界面サイトの開発

上記の貴金属触媒の検討では、活性サイトは貴金属結晶の表面であり、通常は原子が最密パッキングした結晶の安定な面が使われる。より積極的にスケーリング則を脱する狙いをもった研究課題として、異種材料との界面を用いる検討が考えられる。単純な例としては、国内でも研究が進められているカーボンアロイと白金合金のハイブリッドであり、PtCoナノ粒子とCo-N_x-C_yのコンポジットで高い活性と耐久性が報告されている[25]。また、Pt合金と酸化スズの界面を用いた検討でもスケーリング則からの脱却の可能性が報告されている[26]。これらの材料では異種界面を用いるため、貴金属表面に比べると活性点密度が低くなる可能性はあるものの、活性の向上幅を考えると現状では致命的な課題とは言えない。

今後、組み合わせの可能性を発見することを目的とした論文が多く報告されると予想されるため、技術動向の調査は慎重に行う必要がある。質量活性を得るための明確な指針を持ちながら、産業応用に繋がる材料系の見極めが必要な分野とも言える。材料合成目線で考えると、ハイブリッド材料は現行技術同士の組み合わせであり、新規参入の敷居が低く、検討しやすいエンジニアリング技術であるため、多くの材料探索が世界中で行われると考えられる。試料調整の観点では自動・自律実験のエンジニアリング技術との相性が良いと考えられる。また、どのように活性サイト密度を向上するか設計には、活性サイトを突き止める必要があり、材料中の極一部の可能性がある活性サイトの計測・解析技術が1つのブレークスルーとなりえる分野である。

③ 超低白金触媒の開発

上記の貴金属触媒はナノ粒子という形状であり、例えば2.4 nmのPt触媒では約30%の原子が表面にあり、それ以外のPt原子は結晶粒子を形作る土台に使われている。担体に担持する場合は、この割合はさらに低下し、貴金属の原子ベースの使用率は必ずしも高くはない。このような

流れから、貴金属結晶の表面を使わずに、原子や分子レベルで貴金属を操作し、全ての原子を触媒活性サイトとして利用する研究が不均一触媒の分野で研究されている。

特に近年では、単原子触媒として世界中で材料が合成されている[12]。例えば、冒頭にも記載したように酸化鉄の特異な結晶面の Fe 原子の一部を Pt 原子で置換することで、Fe 原子と Pt 原子の間に酸素分子が丁度良く吸着できるサイトが形成され、極めて高い酸素還元活性が報告されている[15]。この例は酸化鉄を利用していることもあり、耐酸性は低く、現行の固体高分子形での利用は難しいと考えられるが、理想的な活性サイトの形成技術としては期待ができる。

母相と置換元素の組み合わせは無数に存在するため、計算での予測技術も重要になっている。例えば、アナターゼ相チタニアの表面 Ti 原子を Pd や Rh で置換することで、スケーリング則を脱する高い酸素還元活性が得られる可能性が予測されている[27]。あくまでも吸着サイトの計算予測であり、触媒としての耐久性や電子伝導性を含めた検証が必要であり、計算と実験の両方から高速で検証する技術も益々と重要になっていくと考えられる。

④非貴金属触媒の開発

貴金属は溶解しにくく、電気伝導性があり、遷移元素特有とも言える触媒活性があるため、電極触媒としては極めて開発がしやすい材料である。しかし、上記のように原子・分子レベルで分散した状態では、これら貴金属の特徴の多くは失われ、あるいは変化し、全く別の物質とも言える状態になる。そのため、貴金属以外の元素を触媒活性サイトとして利用する研究も国内外で行われている。例えば、国内で長年研究されている酸化物触媒や、カーボンアロイ触媒が挙げられる。非貴金属という視点での開発が主だったが、理想的な活性サイトの形成し、白金を凌駕する視点での開発が必要である。

上記の超低白金触媒と同様に、貴金属結晶表面を用いないため、全く異なる活性サイトの形成が可能である。理想的な活性サイトについての議論も様々な視点から行われており、中でも理論予測の研究では、Cytochrom c 酸化酵素の酸素還元活性は理想的な状態である可能性が予測されている[28]。酵素の車載用燃料電池への応用は、活性サイト密度、電子伝導性、耐久性のいずれも現実的ではないかもしれないが、活性サイトおよびそこへの電子供給という視点で重要な視点を与えてくれる研究である。計算技術やデータを用いたインフォマティクス技術などの進展により、燃料電池に最適な活性サイトの予測が期待される。

(4) 電解質膜材料

電解質膜材料では、特にイオン伝導メカニズムについて、どのような想定で何を狙うのかを明確にした開発が必要である。この1文だけでも電解質膜の研究者にとっては重たい意味を持つかもしれないが、革新的な材料開発のために間口を広げる意図として示している。プロトン伝導体の研究の歴史は長く、イオンを粒子として扱う古典的な伝導現象についての基礎学理は30年以上前に確立されていると言える状況である[29]。例えば、酸素原子間をプロトンが水素結合を介して移動する場合、酸素原子間の距離が約 2.7 Å ~ 2.95 Å 程度であることが望ましいことが分かっており[30]、新たなプロトン伝導体の伝統的な設計指針の1つとなっている。

電解質膜として利用可能なマクロな視点での固体材料に限ってみると、伝導メカニズムの違いから、オキソニウムカチオン（水とプロトン）としての伝導体と無水プロトン伝導体とに大別す

ることができる[29]。前者は固体マトリックス中の液相をプロトンが随伴水を伴いながら移動することで、活性化エネルギーが低い特徴を有する。Nafion を含む固体高分子はこちらの分類に属する。後者は固体中でプロトンが安定に存在可能なサイト間をホッピングしながら移動するため、活性化エネルギーが高く、プロトンのみを輸送可能という特徴がある。ゼオライトやプロトン置換 β アルミナなどは、含水は必要であるが、随伴水を伴わない伝導という意味では、燃料電池応用の視点ではこの分類に属する[31,32]。

これら固体イオン伝導体を燃料電池の電解質膜にするためには、イオン伝導性以外にも必要な要素は多い。電解質膜材料に求められる基本特性は、「選択的イオン伝導性」と「長期の安定性」である。前者は、2つの電極間で発電反応に関与するイオン、現行システムであればプロトンのみを伝導し、それ以外の分子やイオンや電子の輸送を遮断することが必要である。現実的には「成膜可能かどうか」もイオン伝導体としての基礎研究から燃料電池の研究へと移行する重要な因子となっている。

また、材料全体を考えた場合、水酸化物イオン伝導体を用いたアニオン交換膜形燃料電池の可能性も排除すべきではない。特に触媒材料の元素選択の幅が広がり、2.6.4(3)で記載したように、アルカリ性では非常に高い活性が報告されている。米国や中国でのアニオン交換膜の研究例や投資が目立つが、耐久性と伝導性ともにプロトン交換膜には及ばないのが現状であり、ゲームチェンジ材料としての研究投資と理解できる。同様に、今後の水素社会の様々な検討の中で、水素ではなく、より高エネルギー密度の燃料を用いる場合、ヒドリドや酸化物イオンなど別の化学種の伝導も車載用燃料電池応用の可能性はあるため、広い視野での情報収集と柔軟な見直しは必要である。

現状では、高分子電解質を成膜したプロトン交換膜が現行システムの要求を満たす材料であるが、2.6.3で示したように、電解質膜については、120°C以上（スタック出口冷却水温度 120°C+5°C程度）の環境での作動が必要になり、さらにイオン抵抗の低減が求められている。このような視点で、イオン伝導メカニズムを意識しつつ、可能性のある研究開発の方向性について以下に示す。

① 随伴水を伴う膜の高度化

上述のように機械的強度などを保持するマトリックス内に形成する水相を用いてイオン輸送を行うタイプの材料であり、比較的成膜性に優れた材料が作りやすい。現行のパーフルオロカーボン材料の電解質膜は成膜性が高く、膜としての機械的強度が高く、車載用サイズであっても均質性に優れた成膜が可能になった技術の結晶とも言える材料系である。しかし、選択性には原理的な限界があり、化学的な耐久性も十分ではないため、ラジカルクエンチャや補強膜の検討も必要であるため、総合的な開発が必要である。

水和プロトンの熱運動に起因する伝導メカニズムにおいては、材料の違いによる差は限定的であり、イオン抵抗を減らすためには2つのアプローチが存在すると考えられる。1つ目はイオン濃度の増大であり、水和エネルギーに起因する膨潤が起り、ゲル状物質ではない固体材料の場合、体積変化に限界があるため材料の機械的強度との背反となる[33]。また、膨潤してしまう場合はガス遮蔽性との背反にもなる。2つ目はイオン伝導距離の短縮化であり、イオン伝導パスの屈曲性の低減や薄膜化により可能になる。薄膜化も機械的強度とガス遮蔽性との背反になる。薄膜

化によって両電極間の水の非平衡状態は緩和されやすく、また、電解質膜が水和プロトンを維持するために保水性を有するため、高温作動には厚膜時よりも適している可能性がある。このように、イオン抵抗の低減について、薄膜化がシステム全体として考えた場合も適したアプローチと言える。

作動温度からの要求を整理すると、100℃以上の動作を目論む場合、液水の沸点以上でも水を安定に保持する材料設計が現行材料の開発の延長として自然な内容と考えられる。さらに溶出しないう別の溶媒や分子で、触媒被毒に繋がらないものを用いることも安定なプロトン輸送の1つの解決策と考えられる。

② 随伴水を伴わない材料の膜化技術の検討

現行の高分子電解質とは異なり、随伴水が無く、水分子の移動が電極間で存在しなくなるため、システム全体としての水管理が大きく異なることになる可能性がある。水の沸点での不連続な特性変化が回避でき、薄膜による燃料クロスリークも回避できる可能性がある材料である。このタイプのイオン伝導体に関しては、基礎研究は多いが、膜化が難しく、基礎研究の論文が大半である。例えば、固体イオン伝導体の分野では、無水プロトン伝導体は盛んに研究された分野であり、 CsHSO_4 などの分子の局所的な運動を利用した高速イオン伝導体が知られているが、室温での伝導率が高くなく、それを薄膜化で補うには機械的強度が充分ではない[34]。固体中の移送の選択制は高いものの、無機固体結晶であるため、粒界による選択制の低下や膜化が難しい。

このため、固体高分子膜が長年の中心的な存在であり、現状での最良の選択であることは間違いない。一方で、近年のプロトン伝導の研究では、プロトンの量子性を用いた研究が進んでいる[35]。この区分の材料では、プロトンのみを選択的に透過させることが可能と言われており、基礎科学的な視点では究極の篩技術として研究が進められている。このような量子篩効果を用いたプロトンの選択的透過はグラフェンや六方晶窒化ホウ素ナノシートでの報告例があり、分子レベルの薄膜での分離が可能になる技術である[35,36]。燃料電池への応用の視点では、電子のトンネル伝導が防げる範囲の分子レベルの薄膜でも、ガス遮蔽性とプロトン伝導性が確保できる可能性があり、粒界制御などの分子・ナノレベルでの物質操作による材料創生技術が必要になる。このような分子膜を利用した電解質膜の研究が活発になると考えられる。

このタイプの電解質膜は新たな学理に根差した部分が強く、基礎研究から応用までの幅広い支援が必要である。また、膜電極接合体全体の設計や加湿システムに変化をもたらす可能性があり、材料の検討と、その後のシステム最適化が材料研究者への負荷が少なくなるように国費プロジェクトとして明確な指針をもって進められるのが望ましい。

③ アニオン交換膜

アニオン交換膜形燃料電池では、非貴金属触媒が利用できるため、コスト面でのメリットが大きいが、アニオン交換基と溶存 CO_2 によって生じる炭酸イオンが、水酸化物イオンの伝導を妨害してしまい、ガスの純度管理などのコストは避けられない可能性がある[33]。しかし、電極触媒に耐酸性を求めるプロトン交換膜と異なり、触媒などの他の材料の選択が全く異なるため、ゲームチェンジ材料となりえるため、システム全体としてのメリットとデメリットを検討しつつ、可能性は検討し続けるべきである。

固体高分子膜に限らず、水酸化物イオン伝導膜の研究は基礎研究に関する学術論文ベースでは盛んである。プロトン伝導膜と同様に機械的強度の向上が鍵であり、現状ではプロトン伝導膜よりイオン伝導率が低く（約 1/3~1/2）、さらに薄膜化が難しい材料である[33]。高分子膜では、プロトンに比べ質量の大きな水酸化物イオンの移動が必要であり、現行のメカニズムでは活性化エネルギーが高く、プロトン伝導膜よりも抵抗が大きい。また、第四級アンモニウムを水酸化物イオンの対カチオンとする高分子を用いる場合では、改善はされてきているものの、その化学的安定性の低さが長年の課題として残っている。

高分子膜の研究は、燃料電池を目的としたアニオン交換膜として現在も主たるものと考えられるが、無機ナノシートを用いたアニオン交換膜の研究例も学術論文では存在する。例えば、層状複水酸化物から得たナノシート材料で層間と粒界を用いた伝導体の研究例がある[37,38]。これら新材料の研究は、燃料電池用途のみではなく、水電解の分野での利用も含めた広い応用が見込まれるため、開発の相乗的な加速が可能である。国内では、これらの分野のどの領域での開発を軸とするかの調整も重要である。

(5) 他の材料・部材

上述の主要材料以外にも燃料電池を動作させるために必須な部材は多く、それらも大切であるが、研究開発のロードマップを考え、時間軸で各項目の依存関係を見たときには、主要材料の特徴に大きく依存する材料や部材の検討はプロジェクトとして俯瞰した調整が必要である。

(参考文献)

- [1] S. Steiner, J. Wolf, S. Glatzel, A. Andreou, J. M. Granda, G. Keenan, T. Hinkley, G. Aragon-Camarasa, P. J. Kitson, D. Angelone, L. Cronin, Organic synthesis in a modular robotic system driven by a chemical programming language. *Science*. **363**, 1–126 (2019).
- [2] C. W. Coley, D. A. Thomas, J. A. M. Lummiss, J. N. Jaworski, C. P. Breen, V. Schultz, T. Hart, J. S. Fishman, L. Rogers, H. Gao, R. W. Hicklin, P. P. Plehiers, J. Byington, J. S. Piotti, W. H. Green, A. John Hart, T. F. Jamison, K. F. Jensen, A robotic platform for flow synthesis of organic compounds informed by AI planning. *Science*. **365** (2019), doi:10.1126/science.aax1566.
- [3] A. Adamo, R. L. Beingessner, M. Behnam, J. Chen, T. F. Jamison, K. F. Jensen, J. C. M. Monbaliu, A. S. Myerson, E. M. Revalor, D. R. Snead, T. Stelzer, N. Weeranoppanant, S. Y. Wong, P. Zhang, On-demand continuous-flow production of pharmaceuticals in a compact, reconfigurable system. *Science*. **352**, 61–67 (2016).
- [4] B. Burger, P. M. Maffettone, V. V. Gusev, C. M. Aitchison, Y. Bai, X. Wang, X. Li, B. M. Alston, B. Li, R. Clowes, N. Rankin, B. Harris, R. S. Sprick, A. I. Cooper, A mobile robotic chemist. *Nature*. **583**, 237–241 (2020).
- [5] S. H. Jang, Y. Tateyama, R. Jalem, High-Throughput Data-Driven Prediction of Stable High-Performance Na-Ion Sulfide Solid Electrolytes. *Adv. Funct. Mater.* (2022), doi:10.1002/adfm.202206036.
- [6] M. Zhong, K. Tran, Y. Min, C. Wang, Z. Wang, C. T. Dinh, P. De Luna, Z. Yu, A. S. Rasouli, P. Brodersen, S. Sun, O. Voznyy, C. S. Tan, M. Askerka, F. Che, M. Liu, A. Seifitokaldani, Y. Pang, S. C. Lo, A. Ip, Z. Ulissi, E. H. Sargent, Accelerated discovery of CO₂ electrocatalysts using active machine learning.

Nature. **581**, 178–183 (2020).

- [7] M. M. Noack, G. S. Doerk, R. Li, J. K. Streit, R. A. Vaia, K. G. Yager, M. Fukuto, Autonomous materials discovery driven by Gaussian process regression with inhomogeneous measurement noise and anisotropic kernels. *Sci. Rep.* **10** (2020), doi:10.1038/s41598-020-74394-1.
- [8] S. Ament, M. Amsler, D. R. Sutherland, M. C. Chang, D. Guevarra, A. B. Connolly, J. M. Gregoire, M. O. Thompson, C. P. Gomes, R. B. Van Dover, Autonomous materials synthesis via hierarchical active learning of nonequilibrium phase diagrams. *Sci. Adv.* **7**, 4930 (2021).
- [9] J. H. Montoya, K. T. Winther, R. A. Flores, T. Bligaard, J. S. Hummelshøj, M. Aykol, Autonomous intelligent agents for accelerated materials discovery. *Chem. Sci.* **11**, 8517–8532 (2020).
- [10] S. Sun, N. T. P. Hartono, Z. D. Ren, F. Oviedo, A. M. Buscemi, M. Layurova, D. X. Chen, T. Ogunfunmi, J. Thapa, S. Ramasamy, C. Settens, B. L. DeCost, A. G. Kusne, Z. Liu, S. I. P. Tian, I. M. Peters, J. P. Correa-Baena, T. Buonassisi, Accelerated Development of Perovskite-Inspired Materials via High-Throughput Synthesis and Machine-Learning Diagnosis. *Joule*. **3**, 1437–1451 (2019).
- [11] P. Nikolaev, D. Hooper, N. Perea-López, M. Terrones, B. Maruyama, Discovery of wall-selective carbon nanotube growth conditions via automated experimentation. *ACS Nano*. **8**, 10214–10222 (2014).
- [12] X. Wang, Z. Li, Y. Qu, T. Yuan, W. Wang, Y. Wu, Y. Li, Review of Metal Catalysts for Oxygen Reduction Reaction: From Nanoscale Engineering to Atomic Design. *Chem.* **5** (2019), pp. 1486–1511.
- [13] A. Kulkarni, S. Siahrostami, A. Patel, J. K. Nørskov, Understanding Catalytic Activity Trends in the Oxygen Reduction Reaction. *Chem. Rev.* **118** (2018), pp. 2302–2312.
- [14] J. H. Montoya, L. C. Seitz, P. Chakthranont, A. Vojvodic, T. F. Jaramillo, J. K. Nørskov, Materials for solar fuels and chemicals. *Nat. Mater.* **16**, 70–81 (2016).
- [15] R. Gao, J. Wang, Z. F. Huang, R. Zhang, W. Wang, L. Pan, J. Zhang, W. Zhu, X. Zhang, C. Shi, J. Lim, J. J. Zou, Pt/Fe₂O₃ with Pt–Fe pair sites as a catalyst for oxygen reduction with ultralow Pt loading. *Nat. Energy*. **6**, 614–623 (2021).
- [16] V. R. Stamenkovic, B. Fowler, B. S. Mun, G. Wang, P. N. Ross, C. A. Lucas, N. M. Markovic, Improved oxygen reduction activity on Pt₃Ni(111) via increased surface site availability. *Science*. **315**, 493–497 (2007).
- [17] Q. Li, L. Wu, G. Wu, D. Su, H. Lv, S. Zhang, W. Zhu, A. Casimir, H. Zhu, A. Mendoza-Garcia, S. Sun, New Approach to Fully Ordered fct-FePt Nanoparticles for Much Enhanced Electrocatalysis in Acid. *Nano Lett.* **15**, 2468–2473 (2015).
- [18] L. Bu, N. Zhang, S. Guo, X. Zhang, J. Li, J. Yao, T. Wu, G. Lu, J. Y. Ma, D. Su, X. Huang, Biaxially strained PtPb/Pt core/shell nanoplate boosts oxygen reduction catalysis. *Science*. **354**, 1410–1414 (2016).
- [19] J. Li, Z. Xi, Y. T. Pan, J. S. Spendelow, P. N. Duchesne, D. Su, Q. Li, C. Yu, Z. Yin, B. Shen, Y. S. Kim, P. Zhang, S. Sun, Fe Stabilization by Intermetallic L10-FePt and Pt Catalysis Enhancement in L10-FePt/Pt Nanoparticles for Efficient Oxygen Reduction Reaction in Fuel Cells. *J. Am. Chem. Soc.* **140**, 2926–2932 (2018).
- [20] J. Li, S. Sharma, X. Liu, Y. T. Pan, J. S. Spendelow, M. Chi, Y. Jia, P. Zhang, D. A. Cullen, Z. Xi, H. Lin, Z. Yin, B. Shen, M. Muzzio, C. Yu, Y. S. Kim, A. A. Peterson, K. L. More, H. Zhu, S. Sun, Hard-Magnet L10-CoPt Nanoparticles Advance Fuel Cell Catalysis. *Joule*. **3**, 124–135 (2019).

- [21] T. Kumeda, H. Tajiri, O. Sakata, N. Hoshi, M. Nakamura, Effect of hydrophobic cations on the oxygen reduction reaction on single-crystal platinum electrodes. *Nat. Commun.* **9** (2018), doi:10.1038/s41467-018-06917-4.
- [22] B. Genorio, D. Strmcnik, R. Subbaraman, D. Tripkovic, G. Karapetrov, V. R. Stamenkovic, S. Pejovnik, N. M. Marković, Selective catalysts for the hydrogen oxidation and oxygen reduction reactions by patterning of platinum with calix[4]arene molecules. *Nat. Mater.* (2010), doi:10.1038/NMAT2883.
- [23] D. Y. Chung, S. W. Jun, G. Yoon, S. G. Kwon, D. Y. Shin, P. Seo, J. M. Yoo, H. Shin, Y. H. Chung, H. Kim, B. S. Mun, K. S. Lee, N. S. Lee, S. J. Yoo, D. H. Lim, K. Kang, Y. E. Sung, T. Hyeon, Highly Durable and Active PtFe Nanocatalyst for Electrochemical Oxygen Reduction Reaction. *J. Am. Chem. Soc.* **137**, 15478–15485 (2015).
- [24] X. Zhu, X. Tan, K. H. Wu, S. C. Haw, C. W. Pao, B. J. Su, J. Jiang, S. C. Smith, J. M. Chen, R. Amal, X. Lu, Intrinsic ORR Activity Enhancement of Pt Atomic Sites by Engineering the d-Band Center via Local Coordination Tuning. *Angew. Chemie Int. Ed.* **60**, 21911–21917 (2021).
- [25] L. Chong, J. Wen, J. Kubal, F. G. Sen, J. Zou, J. Greeley, M. Chan, H. Barkholtz, W. Ding, D.-J. Liu, “Ultralow-loading platinum-cobalt fuel cell catalysts derived from imidazolate frameworks,” (available at <https://www.science.org>).
- [26] X. Shen, T. Nagai, F. Yang, L. Q. Zhou, Y. Pan, L. Yao, D. Wu, Y. S. Liu, J. Feng, J. Guo, H. Jia, Z. Peng, Dual-Site Cascade Oxygen Reduction Mechanism on SnOx/Pt-Cu-Ni for Promoting Reaction Kinetics. *J. Am. Chem. Soc.* **141**, 9463–9467 (2019).
- [27] Y. Yamamoto, S. Kasamatsu, O. Sugino, Scaling Relation of Oxygen Reduction Reaction Intermediates at Defective TiO₂ Surfaces. *J. Phys. Chem. C.* **123**, 19486–19492 (2019).
- [28] C. H. Kjaergaard, J. Rossmeisl, J. K. Nørskov, Enzymatic versus inorganic oxygen reduction catalysts: Comparison of the energy levels in a free-energy scheme. *Inorg. Chem.* **49**, 3567–3572 (2010).
- [29] P. Colomban, (*Symbols*) *Proton conductors Solids, membranes and gels-materials and devices* (Cambridge online, 2014).
- [30] A. Potier, *1 The hydrogen bond and chemical parameters favouring proton mobility in solids* (Cambridge online, 2014).
- [31] P. Colomban, (*Index*) *Proton conductors Solids, membranes and gels materials and devices* (2014).
- [32] S. Tominaka, A. K. Cheetham, Intrinsic and extrinsic proton conductivity in metal-organic frameworks †. *RSC Adv.* **4** (2014), doi:10.1039/c4ra11472f.
- [33] S. Gottesfeld, D. R. Dekel, M. Page, C. Bae, Y. Yan, P. Zelenay, Y. S. Kim, Anion exchange membrane fuel cells: Current status and remaining challenges. *J. Power Sources.* **375**, 170–184 (2018).
- [34] P. Colomban, A. Novak, in *Proton Conductors: Solids, Membranes and Gels - Materials and Devices*, P. Colomban, Ed. (Cambridge University Press, Cambridge, 2014), pp. 165–182.
- [35] S. Hu, M. Lozada-Hidalgo, F. C. Wang, A. Mishchenko, F. Schedin, R. R. Nair, E. W. Hill, D. W. Boukhvalov, M. I. Katsnelson, R. A. W. Dryfe, I. V. Grigorieva, H. A. Wu, A. K. Geim, Proton transport through one-atom-thick crystals. *Nature.* **516**, 227–230 (2014).
- [36] Y. Jiang, J. Ma, C. Yang, S. Hu, One-Atom-Thick Crystals as Emerging Proton Sieves. *J. Phys. Chem. Lett.* **2021**, **12**, 47 (2022).

- [37] K. Tadanaga, Y. Furukawa, A. Hayashi, M. Tatsumisago, Direct ethanol fuel cell using hydrotalcite clay as a hydroxide ion conductive electrolyte. *Adv. Mater.* **22**, 4401–4404 (2010).
- [38] P. Sun, R. Ma, X. Bai, K. Wang, H. Zhu, T. Sasaki, “Single-layer nanosheets with exceptionally high and anisotropic hydroxyl ion conductivity,” (available at <https://www.science.org>).

2.6.5 評価・解析技術

(1) 材料・プロセス探索加速のための DX 技術

2.6.4 の材料設計指針で述べたように、40 年目標達成シナリオで目指す新たな材料が必要とされている。この開発速度を向上させるためには、材料探索高速化や開発期間の短縮が必要となる。従来の労働集約型の試行錯誤による材料開発では開発速度の高速化は限定的であるため、マテリアルズ・インフォマティクス (MI) を用いた材料設計指針の提示に基づく開発が必要となる。従来、モデル作成に用いる説明変数データについて、各計測法で別々に取得していたため、データ取得に時間がかかる、データの信頼性が低いなどの問題が生じた。今後、計測のフィジカル空間での効率化については、同一試料の構造および電子構造データを同時にマルチモーダルでの取得、計測のロボティクス利用などを活用した計測インフォマティクスの活用が必要となる。触媒開発についての DX 技術活用例を図 2.6.5-1 に示す。触媒の自動合成と、粉末 X 線回折 (XRD)、X 線吸収分光 (XAFS)、小角 X 線散乱 (SAXS)、高エネルギー X 線回折・二体相関関数解析 (PDF) などの既存の解析ツールのプラットフォーム化を組み合わせる。階層的構造情報のロボティクス利用による高速取得可能なシステムの開発によるフィジカル空間での情報取得の効率化と、触媒性能を教師データとして用いたバーチャル空間での最適触媒構造の迅速決定がなされる。

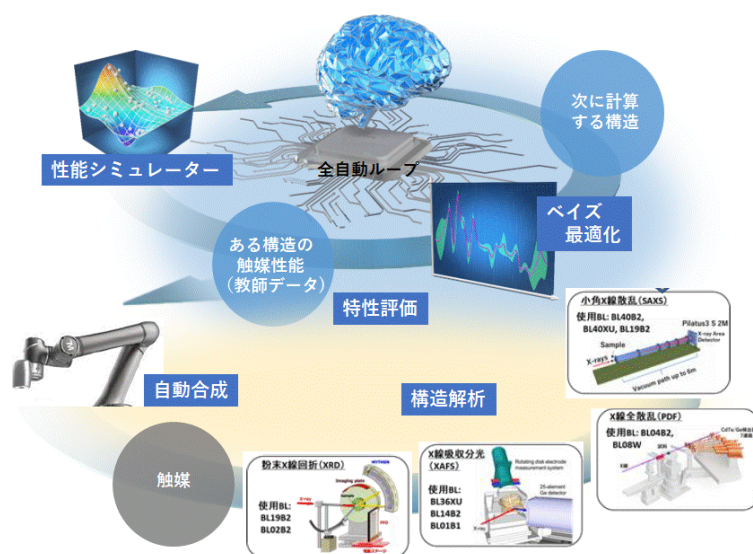


図 2.6.5-1 DX 技術を用いた触媒開発の高速化

材料の高度化に加えて、燃料電池の作製プロセスの高度化も同時に行う必要がある。現在の燃料電池作製プロセスは、触媒の調合・混練、塗工・乾燥、成型、接着などの多くの過程から構成されている。燃料電池の量産化に伴い、このプロセスの最適化を迅速に行い、高速化をはかることは、コスト低減に直結する。図 2.6.5-2 に示すように、様々なプロセス過程の状態をリアルタイムで計測する *operando* 解析により把握し、データ科学を活用することにより、プロセスの制御因子を明らかにして最適なプロセスを設計することが出来る。

分解能解析のようなコストの高い計測となるため、計測の高速化・効率化、自動・自律計測が必要になる。高感度・高精度、オペランド環境下で取得された大量データをデータベース化し、活用する DX 化を推進するインフラの整備も必要である。

高度計測においては、測定対象に対して最も感度が高いエネルギーをもつプローブを選択し、その応答を解析することで構造や現象を把握する。硬 X 線から軟 X 線領域の X 線を用いる放射光解析、電氣的に中性な特徴を持つ中性子線解析、電子をプローブとして高い空間分解能をもつ電子顕微鏡解析・電子分光、ラマン・赤外・テラヘルツ分光を利用する振動分光[1]、電磁波を利用する核磁気共鳴、電子スピン共鳴、ナノプローブを利用する走査プローブ顕微鏡など[2,3]、多様な材料・現象からなる PEFC の解析においては、多様な解析技術を総合的に活用することが望まれる。



図 2.6.5-3 現象・機構解明のための解析ツール

- [1] T. Morimoto, M. Nagai, Y. Minowa, M. Ashida, Y. Yokotani, Y. Okuyama, Y. Kani, Microscopic ion migration in solid electrolytes revealed by terahertz time-domain spectroscopy. *Nat Commun* **10**, 2662 (2019).
- [2] T. Motegi, K. Yoshimura, Y. Zhao, A. Hiroki, Y. Maekawa, Direct Observation and Semiquantitative Analysis of Hierarchical Structures in Graft-Type Polymer Electrolyte Membranes Using the AFM Technique. *Macromolecules* **54** (9), 4128-413 (2021)
- [3] R. Kempaiah, G. Vasudevamurthy, A. S ubramanian, Scanning probe microscopy based characterization of battery materials, interfaces, and processes. *Nano Energy* **65** 103925 (2019)

【量子ビーム解析技術】

国内には、世界でも最高レベルの性能を誇る先端大型放射光施設（SPring-8）、大強度陽子加速器施設（J-PARC）などの放射光および中性子実験施設が稼働しており、主として高輝度軟 X 線を扱う 3GeV 先端放射光施設（NanoTerasu）が建設中である。これらの量子ビーム施設を用いた解析には高い透過能を利用した、*in situ*（その場）測定や、*operando*（実動作下、燃料電池の場合は発電状態下）測定が含まれる。各大型実験施設においては、今後数年のうちに大規模なアップグレードが計画されており、DX 化も含めた計測・解析手法の飛躍的向上が期待される。SPring-8 で利用可能な硬 X 線、NanoTerasu で利用可能な軟 X 線、J-PARC で利用される中性子は異なる性質をもち、マルチスケールの高度な現象解析をカバーするため、相補的な活用が望まれる。



	SPring-8	ナノテラス	J-PARC
線源	放射光X線		中性子線
	高エネルギー領域(硬X線)	低エネルギー領域(軟X線)	
対象	構造 セルイメージング プロセス技術	化学結合 高時間・高空間分解能 新原理材料開発	構造・分子運動 大視野イメージング 材料・部品開発
技術 (手法二例)	高エネルギーX線回折・全散乱 雰囲気制御下の触媒および触媒担体の 中長期構造 X線小角散乱(SAX) 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	軟X線XAFS 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 高分解能軟X線RIXS 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	中性子イメージング 燃料電池作動状態でのフルサイズセルの 水/水分布状態 中性子小角散乱(SANS)/反射率(NR) アイオノマ/電解質膜、接合界面のナノスケール 構造
	GI-WAXS, GI-SAXS 雰囲気制御下のアイオノマーの構造、配向性	高分解能軟X線タイコグラフィ 触媒層中のカーボン担体、アイオノマーの三次元構 造	中性子準弾性散乱(QENS) 触媒層/電解質膜の水・プロトンの分子運動 (拡散・振動・回転)
組織・人材	産業界と連結 ダイナミックな体制運営 予算		

図 2.6.5-4 国内の量子ビーム施設とその特徴

主に NanoTerasu で利用可能な軟 X 線（低エネルギー）は、表面構造や化学結合に敏感なため、化学結合状態の解析や高空間分解能イメージングに適しており、40 年目標である新原理材料の開発への適用が期待される。特に、軟 X 線 XAFS、高分解能 RIXS、AP(Ambient pressure)-PES は、NanoTerasu で実現される高輝度軟 X 線の活用で、大幅に時間・空間分解能が向上する。40 年目標でのカソード触媒開発において、スケーリング則からの脱却の重要性が示されているが、そのためには触媒反応機構をより定量的に解明する必要がある。燃料電池反応は酸素や水等の含酸素分子が関与する反応であり、触媒界面での酸素の振る舞いを直接解析することが望まれる。酸素の軌道を直接的に観察する手法に XAFS や XES がある。XAFS では酸素の非占有 $2p$ 軌道の電子状態を知ることができ、RIXS では占有 $2p$ 軌道の電子状態を知ることができる。これらの酸素の吸収端（電子軌道）の情報とシミュレーションとの連携により反応機構の解明がすすむことが期待される。NanoTerasu では、コヒーレンスの高い光源が得られるので、タイコグラフィのような空間分解能が高いイメージングにより、触媒反応や電解質膜における現象解析を、単一原子レベルから可能になると期待される。

SPring-8 では、硬 X 線（高エネルギー）領域における各種計測の適用が既に活発に行われている。硬 X 線は、高い物質透過性をもち、回折（X 線回折、反射率）、散乱（小角散乱、全散乱、コ

ンプトン散乱)、分光 (吸収・発光分光・光電子分光)、イメージングなど多くの X 線解析技術の適用が可能である。既に DX 技術との連携の際に述べているが、これらの多くの既存の解析ツールのプラットフォーム化が望まれる。今後、*operando* 計測も含めた材料の構造解析、セルイメージング、プロセス解析への適用が可能である。実材料・電極レベルで多様な解析が可能なることから、単一材料の解析はもちろん可能であるが、担持された触媒やアイオノマで被覆された触媒層など、不均一な分布をもつ材料のマルチモーダル解析へ展開が可能である。また、触媒インクの乾燥過程のような触媒層形成プロセスにおける多成分系の複雑な構造・現象解析への適用も期待される。こうした計測は、多様な条件下でのデータを取得し、MI・PI と連動させることで活用されることになる。そのために、DX と連動した専用の計測装置、合成装置を備えた専用ビームライン化もひとつの選択肢と考えられる。

中性子は水素を含む材料・部品の解析に威力を発揮する。中性子は原子番号の小さな水素に敏感なため、燃料電池の出力性能を左右する水の動的挙動や、プロトン伝導の解析に有用である。また、中性子は電荷を持たないため物質に対する透過率が高く、非破壊で繰り返し評価できることから、セルのレベルでの *operando* 測定が可能となる。燃料電池に应用されている解析手法の概要を下図に示す。これらの手法は、燃料電池におけるプロトン伝導、ガス輸送、水輸送等の物質輸送に関する有用な情報を提供する。

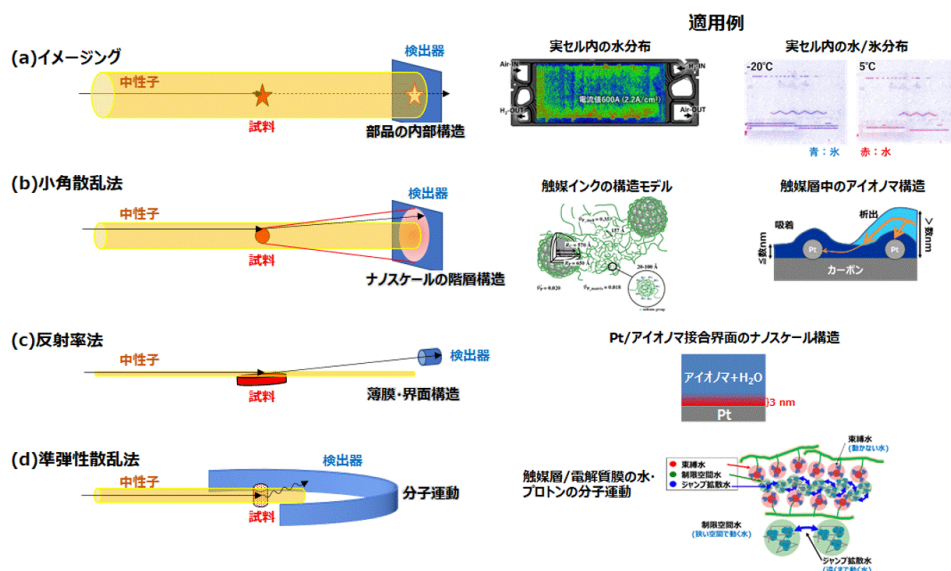


図 2.6.5-5 中性子による材料・部品の各種解析手法と適用例

中性子イメージングは試料の透過像を観測する技術であり、X 線イメージングと比較すると、透過率が軽元素にも敏感であるため、金属中の有機物等の軽元素を可視化する際に優位である。そのため金属セパレータで締結された燃料電池セル内において、発電により生成した水分の解析に用いることができる。また、一般的に、中性子イメージングは放射光 X 線イメージングに比べ、大視野観察が可能であり、部品をそのまま非破壊で内部状態を観察できる。MLF (J-PARC) の RADEN ビームライン (BL22) において、トヨタ自動車の第 2 世代 MIRAI の実機セルサイズ (約 300 cm²) の水の挙動を可視化することに成功している [4]。

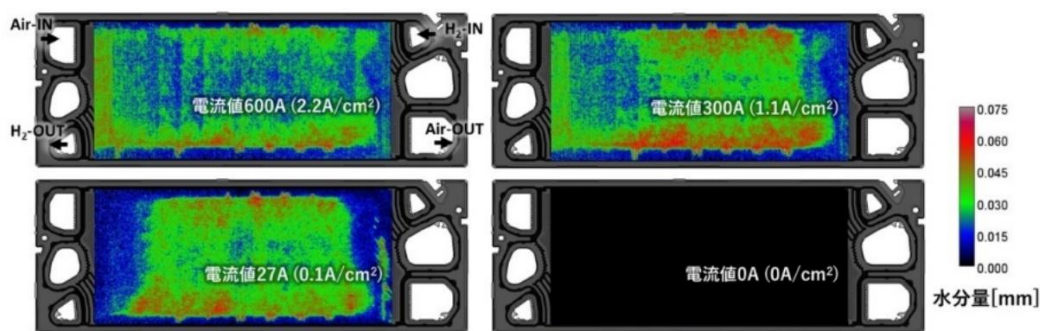


図 2.6.5-6 中性子イメージングによる水の挙動の可視化[4]

エネルギー分析型のイメージングを適用した場合、分子の運動性の違いから液水よりも氷の方が、透過率が数%高いため、液水と氷とを区別することができる [5]。燃料電池は、氷点下においても起動・運転されるため、内部での氷の生成部位や生成機構の解明は、実装における重要な課題である。より実用に近い条件での観察には、時間分解能（空間分解能含む）の向上が必要であり、そのためには中性子ビームの強度化が求められる。ビーム強度が向上した燃料電池を専用とするビームラインが新設されれば、世界トップの *operando* 中性子イメージング技術と、ビームタイムが確保されることで、日本が弱いとされる実装への加速が期待される。なお、米国では、DOE 主導で 2002 年に、燃料電池専用のビームライン（NIF）が建設されており、現在、様々な水素関連の解析に用いられている [6]。

その他の中性子をプローブとした技術として、小角中性子散乱法（SANS）を用いた触媒インクやアイオノマ構造などのナノスケールの階層構造評価 [7,8]、中性子反射率法（NR）を用いたアイオノマ薄膜の構造解析 [9]、中性子準弾性散乱法（QENS）を用いたアイオノマ中のプロトン伝導解析 [10] などのさらなる適用が期待される。

（参考文献）

- [4] https://www.nedo.go.jp/news/press/AA5_101558.html
- [5] Y. Higuchi, D. Setoyama, K. Isegawa, Y. Tsuchikawa, Y. Matsumoto, J. Parker, T. Shinohara, Y. Nagai, Pulsed neutron imaging for differentiation of ice and liquid water towards fuel cell vehicle applications. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **23** (2), 1062-1071 (2021).
- [6] <https://physics.nist.gov/MajResFac/NIF/>
- [7] B. Loppinet, G. Gebel, C. Williams, Small-Angle Scattering Study of Perfluorosulfonated Ionomer Solutions. *J. Phys. Chem. B*, **101** (10), 1884-1892 (1997).
- [8] M. Harada, S. Takata, H. Iwase, S. Kajiya, H. Kadoura, T. Kanaya, Distinguishing Adsorbed and Deposited Ionomers in the Catalyst Layer of Polymer Electrolyte Fuel Cells Using Contrast-Variation Small-Angle Neutron Scattering. *ACS Omega*, **6** (23), 15257-15263 (2021).
- [9] K. Ito, M. Harada, N. Yamada., K. Kudo, H. Aok, T. Kanaya, Water Distribution in Nafion Thin Films on Hydrophilic and Hydrophobic Carbon Substrates. *Langmuir*, **36** (43), 12830-12837 (2020).
- [10] K. Ito, T. Yamada, A. Shinohara, S. Takata, Y. Kawakita, Dynamics of Water in a Catalyst Layer of a Fuel Cell by Quasielastic Neutron Scattering. *J. Phys. Chem. C*, **125**, 21645-21652 (2021)

【電子顕微鏡技術】

電子顕微鏡解析は、オングストローム～ナノサイズに形成可能な電子線をプローブとし、高い分解能を持つ局所構造解析が特徴である。40年目標で想定されるシングルアトムサイトを含む触媒、ヘテロ界面を活用した新機能触媒の開発や新たなプロトン・水などの輸送機構を含む電解質膜の解析には、欠かせない解析ツールの一つとして期待される。電子ビーム形成技術や検出器感度の向上、機械学習等を用いることで分解能が向上は著しく、原子像の直接観察、原子レベルでの元素識別、化学状態計測が可能になりつつある[11-13]

触媒反応機構や電解質膜における物質輸送の解析に向けては、触媒・担体へのアイオノマ被覆構造、アイオノマ分散状態、アイオノマ・電解質膜の高分子ナノ構造などの直接的な観察など、電子線照射ダメージを低減しながら、含水状態など燃料電池動作環境に近い状態計測可能なクライオ電子顕微鏡の活用[14]が期待される。触媒の合成、反応時の挙動などの直接的な観察に向けた *operando* 電子顕微鏡の開発も検討が進んでいる[15,16]。

開発される触媒の性能を最適化するための触媒層構造、MEA 構造、流路設計等についても、先端で電子顕微鏡を量子ビーム計測と相補的に活用することが期待される。3D-TEM による担体上（内部も含む）触媒やアイオノマの分散状態の3次元可視化[17,18]、クライオ電子顕微鏡を用いた触媒インクや触媒層の3次元可視化[19]は、クライオ TEM による触媒や担体上のアイオノマ被覆状態の可視化、クライオ SEM による乾燥過程の観察[20]、超低加速電圧 SEM によるアイオノマ識別など、画像解析技術の発展とともに急速に活用が進んでいる。また、大量に画像データを取得し特徴量解析から、構造と性能の相関を調べる DX への取り組みも始まっている[21]。

（参考文献）

- [11] S. Dai, Y. Hou, M. Onoue, S. Zhang, W. Gao, X. Yan, G. W. Graham, R. Wu, X. Pan, Revealing Surface Elemental Composition and Dynamic Processes Involved in Facet-Dependent Oxidation of Pt₃Co Nanoparticles via in Situ Transmission Electron Microscopy. *Nano Lett.* **17** (8), 4683-4688 (2017)
- [12] J. Li, H. Yin, X. Li, E. Okunishi, Y. Shen, J. He, Z. Tang, W. Wang, E. Yücelen, C. Li, Y. Gong, L. Gu, S. Miao, L. Liu, J. Luo, Y. Ding, Surface evolution of a Pt-Pd-Au electrocatalyst for stable oxygen reduction. *Nat Energy* **2**, 17111 (2017).
- [13] S. Bals, B. Goris, L. Liz-Marzán, G. Van Tendeloo, Three-Dimensional Characterization of Noble-Metal Nanoparticles and their Assemblies by Electron Tomography *Angew. Chem. Int. Ed.* **53**, 10600–10610 (2014)
- [14] J. Shimanuki, S. Takahashi, H. Tohma, A. Ohma, A. Ishihara, Y. Ito, Y. Nishino, A. Miyazawa, Microstructural observation of fuel cell catalyst inks by Cryo-SEM and Cryo-TEM. *Microscopy*, **66**, 204–208 (2017)
- [15] T. Altantzis, I. Lobato, A. De Backer, A. Béché, Y. Zhang, S. Basak, M. Porcu, Q. Xu, A. Sánchez-Iglesias, L. M. Liz-Marzán, G. Van Tendeloo, S. Van Aert, S. Bals, Three-Dimensional Quantification of the Facet Evolution of Pt Nanoparticles in a Variable Gaseous Environment. *Nano Letters* **19** (1), 477-481 (2019)
- [16] S. Dai, Y. You, S. Zhang, W. Cai, M. Xu, L. Xie, R. Wu, G. W. Graham, X. Pan, In situ atomic-scale observation of oxygen-driven core-shell formation in Pt₃Co nanoparticles. *Nat. Commun.* **8**, 204 (2017).

- [17] M. Lopez-Haro, L. Guétaz, T. Printemps, A. Morin, S. Escribano, P.-H. Jouneau, P. Bayle-Guillemaud, F. Chandezon & G. Gebel, Three-dimensional analysis of Nafion layers in fuel cell electrodes. *Nat. Commun.* **5**, 5229 (2014).
- [18] M. Ko, E. Padgett, V. Yarlalagadda, A. Kongkanand, D. Muller, Revealing the Nanostructure of Mesoporous Fuel Cell Catalyst Supports for Durable, High-Power Performance. *J. Electrochem. Soc.* **168** 024512 (2021)
- [19] J. Shimanuki, H. Imai, Y. Ito, Y. Nishino, A. Miyazawa, Microstructural observation of the swollen catalyst layers of fuel cells by cryo-TEM. *Microscopy*, (2022)
- [20] J. Shimanuki, S. Takahashi, H. Tohma, A. Ohma, A. Ishihara, Y. Ito, Y. Nishino, A. Miyazawa, Microstructural observation of the swollen catalyst layers of fuel cells by cryo-TEM. *Microscopy*, **66**, 204–208 (2017)
- [21] H. Yu, M. J. Zachman, K. S. Reeves, J. Park, N. Kariuki, L. Hu, R. Mukundan, K. Neyerlin, D. Myers, D. Cullen, Tracking Nanoparticle Degradation across Fuel Cell Electrodes by Automated Analytical Electron Microscopy. *ACS Nano* **16**, 12083-12094 (2022)

(3) 現象・機構解明 (計算科学)

計算科学は、物理・化学現象をモデル化し計算機上でシミュレーションすることで、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することができる。また、こうして構築されたモデルを未踏領域へと外挿して適用することにより、新たな材料や製品の性能を予測することもできる。こうした観点から計算科学は、最先端のサイエンスや産業競争力の強化に不可欠な研究手法である。

PEFC の研究開発においても計算科学は重要な役割を担っており、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、これらの材料・部材の特性に基づくセル・スタック性能予測、さらには各アプリケーションの実運転モードに対する FC システムの予測など、材料・部材開発、スタック・システム設計に活用するシーンは多岐に亘る。図 2.6.5-6 に PEFC のシミュレーション技術を時空間スケールで整理したイメージを示す。空間スケールは触媒の nm からスタック・システムの m オーダー、時間スケールとしては反応機構の ps オーダーからアプリケーションの実運転の hour オーダーと幅広い時空間スケールに及ぶ。

こうしたシミュレーション技術の基盤として、現行の NEDO 事業においては、電解質膜の化学・機械劣化予測、製造プロセスからの触媒層構造の予測、電極構造からセルまでのマルチスケール発電性能予測、モデルベースの PEFC システム予測など、PEFC の長寿命化・高性能化達成のための設計シミュレーション技術の開発が進行中である。

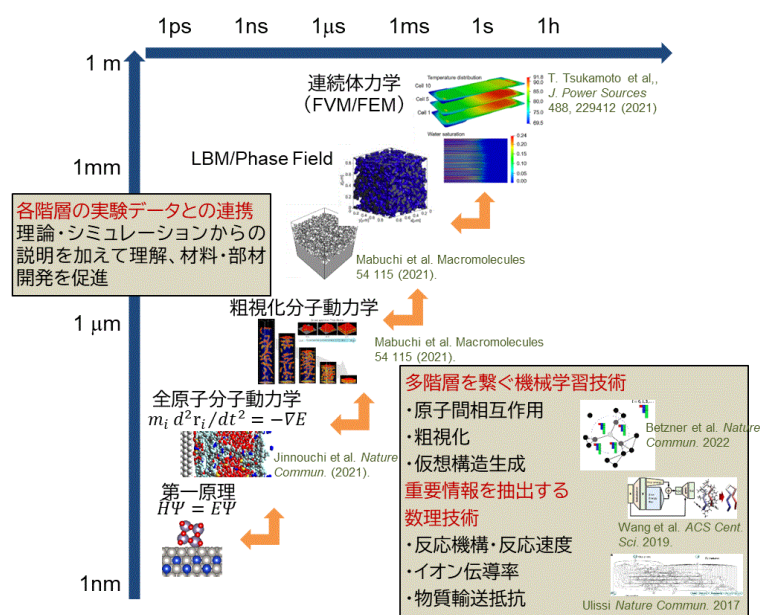


図 2.6.5-6 PEFC におけるトランススケールシミュレーション技術

計算科学のもう一つの重要な役割として、図 2.6.5-7 に示すように、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が挙げられる。原理・原則に基づき、現象の要点をおさえたモデルを構築し、実験・解析と比較検証することにより、高速かつ高精度に所望の物性を予測し材料をスクリーニングできるようになると期待される。

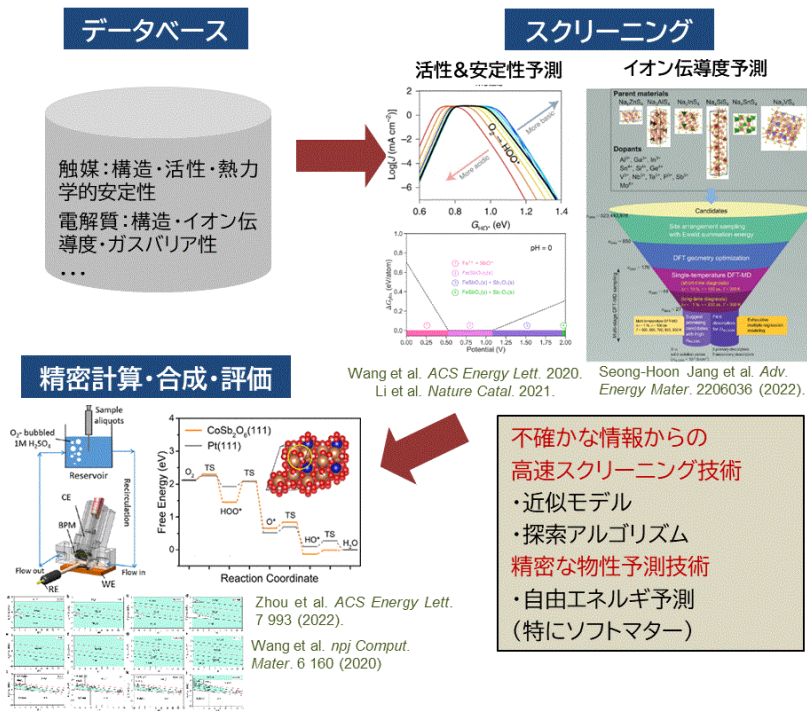


図 2.6.5-7 ハイスループット材料探索技術

このように幅広い時空間スケールを繋ぎ、材料レベルの新原理・研究開発の方向性を見出しつつ、PEFCの性能・劣化を予測するトランススケールシミュレーション技術、広範な新材料探索を実現するハイスループットスクリーニング技術の双方において重要なことは、図 2.6.5-8 に示すように、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である。また、このような計算科学技術を具現化する上で鍵となるのが、高精度化・高速化によるシミュレーションを適用できる時空間スケール・現象の拡大、シミュレーションの加速やデータから有用な情報を抽出するための機械学習・インフォマティクス・データベースの構築であり、世界では半年で情勢が変化するほどのスピードでアルゴリズム開発とプラットフォーム整備が進んでいる。こうした中核技術の構築と継続的な高度化がPEFCの開発競争力の維持に向けて急務である。

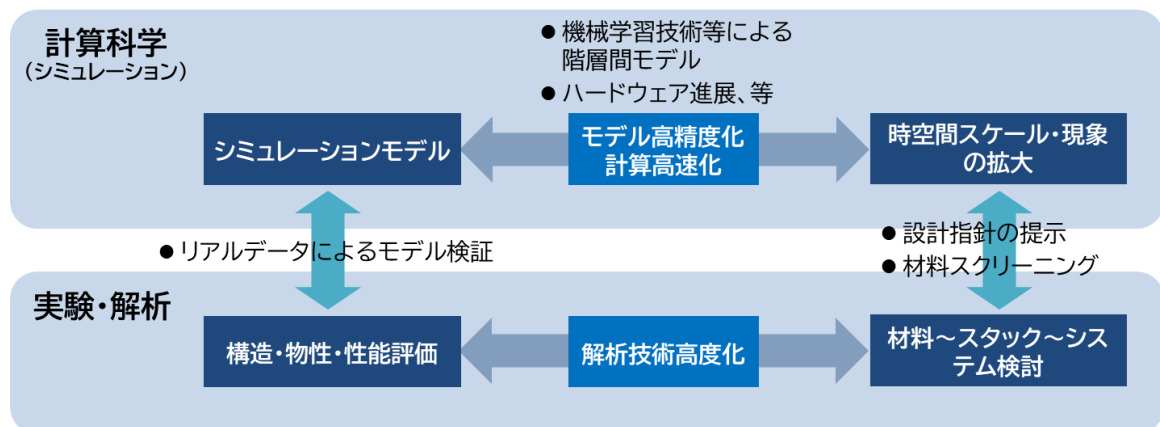


図 2.6.5-8 シミュレーションと実験・解析との連携

①触媒・電解質材料における計算科学

表 2.6.2-1、表 2.6.3-1 のとおり、電解質のプロトン伝導率とカソード触媒の酸素還元活性との格段の向上は必須の課題である。加えて、HDV 向けの長い寿命を担保できる材料の耐久性が求められる。2.6.2 で触れたとおり、現行材料を極限的に進化させた形態と不連続的な革新材料との両者の研究開発が必要とされ、計算科学には、その方向性を示す新しい原理や材料の提示、そしてそれらが示す限界の予測が求められる。こうした目的に対して、量子化学・第一原理計算や分子動力学シミュレーション (MD) 等の原子スケールの材料シミュレーション技術[1-4]は有力な手段である。またこれらのシミュレーションを加速したり[5-13]、シミュレーションから得られる情報をメソ・マクロスケールのシミュレーションに受け渡すことで実験と比較可能な定量情報を得たり[14-16]、シミュレーションから得られる結果あるいはそれをとりまとめたデータベースを構築して、データ駆動的に材料をスクリーニングする計算科学・インフォマティクスのアプローチ[17-21]は有望であり、既に世界中で、計算技術の研究開発が活発に行われている。

触媒材料を例に、計算科学・インフォマティクスに期待される展望と求められる技術を示す。既往の触媒の酸素還元反応活性は、図 2.6.5-9a に示す Volcano plot で整理される[1,4]。これは同図 b に示す酸素還元反応の反応中間体の生成速度 (例えば OOH 生成速度) と除去速度 (例えば OH 除去速度) とに背反関係があるためとされる。OOH を安定化する活性点は、OH も安定化するため、両者の速度に背反が生じるとの概念であり、これが現行触媒の活性の限界を決定する[1,4]。実用的な触媒材料を実現する上で忘れてはならないもう一つの重要事項は、活性と耐久性との背反関係である。これは現状の確立された触媒の高活性化手段である Pt の合金化・コアシェル化が、Pt よりも溶出しやすい元素の導入に依存しているためである。2040 年頃の触媒活性目標を実現する手段は二つに大別される。一つは、図 2.6.5-9a の Volcano plot の枠組みの中で、安定な材料を組み合わせ、触媒と OH・OOH との結合力を最適化する Pt 単原子層等の比表面積が究極的に大きい材料を探索するアプローチ①である (図 2.6.5-9a のオレンジの矢印、図 2.6.5-9d の例 1 のようなアプローチ)。これは従来の合金・コアシェル材料探索で長年、取り組まれてきたアプローチであるが、無数にある材料のバリエーションが検討され尽くしたとは言えず、継続して取り組まれるべきアプローチ②と言える。もう一つは、OH・OOH の安定性を独立して制御することにより、既存の Volcano plot の制約を超えるアプローチである (例えば図 2.6.5-9a の赤の矢印、図 2.6.5-9d の例 2 のようなアプローチ)。例えば、ヘテロ界面、修飾物、電解質等により、特定の分子のみを安定化するテイラーメードな活性点の創生がこれに当たる[4]。なお後者のアプローチも、安定な材料の組み合わせで実現しなければならないことは言うまでもない。

いずれのアプローチにおいても、稼働環境下での活性サイトの安定性・活性を予測、反応機構を解明、個別の材料群の限界を提示する計算技術の開発が重要と考えられる。これを実現する上で有望と考えられる計算技術として、例えば図 2.6.5-10a に示すように、既往の知見をデータベース化し、データから有望な材料構造を予測し、これらの安定性・活性をハイスループットで評価し、その結果をデータベースに登録する、といったサイクルを自律的に行うプラットフォームが挙げられる。こうしたプラットフォームを構築するためには、データベースに蓄えられた安定性・活性との隠れたパターンを抽出しモデル化するインフォマティクス技術[5-7,22-30]、見出されたパターンから有望な新しい構造を自動生成する技術[31-35]、与えられた構造から高速に安定性・活性を評価する技術[5-11,19,20,36]が必要となる。現在も、このようなデータ駆動の材料探索プラ

ットフォーム構築を目指した活発な研究開発が世界中で行われており、図 2.6.5-10 b に示すように、データベースのデータ点数と論文中の評価点数とは年々、増え続けている[4,17-20,37]。他方、こうした既存の評価解析技術の自律化・高速化に加えて、新しい原理を発見する上で、従来の計算技術では難しい複雑な材料系を対象とできるよう、計算技術を高度化することも重要である。従来の計算技術は主に、真空あるいは水中の結晶表面等の理想的な触媒表面を評価対象としてきた。これらの解析から、Volcano plot[4]が得られた訳であるが、図 2.6.5-9d のように Volcano plot を超える原理を発見するには、ヘテロ界面、表面修飾、電解質といった、これまで考慮されてこなかったより複雑な材料系を評価できるようにならなければならない。ここで重要な技術と考えられるのが、機械学習や量子コンピューティングといった新規計算技術による高速・高精度計算技術である。図 2.6.5-10c の、機械学習を分子シミュレーションに応用する機械学習力場による分子動力学計算の速度・精度の進展に見られるように、こうした新技術も目まぐるしく進化しており[38]、従来の計算技術では不可能であった、電解液中のヘテロ界面の活性予測のような困難な問題が、解析対象として視野に入るようになってきた[10,11]（このようなシミュレーション技術の高度化については次頁以降もう少し詳しく述べる）。以上のデータ駆動型・自律的材料探索技術と複雑材料系の物性予測技術とは電解質においても重要であり、こうした技術を着実に発展させることが新原理を発見し、限界を明示する上で鍵となる。加えて、これらの計算技術の妥当性を担保する上で、実験・解析との密な連携が必要であることは言うまでもない。本解説書でも述べる通り、実験においても自律化が格段に進化し、得られるデータ量が数桁多くなると予想されている。このように計算・実験双方から提示されるこれまでにない量のデータを系統的に比較・検証し、計算科学の妥当性を検証しつつ、新しい材料・原理を提示することが求められる。

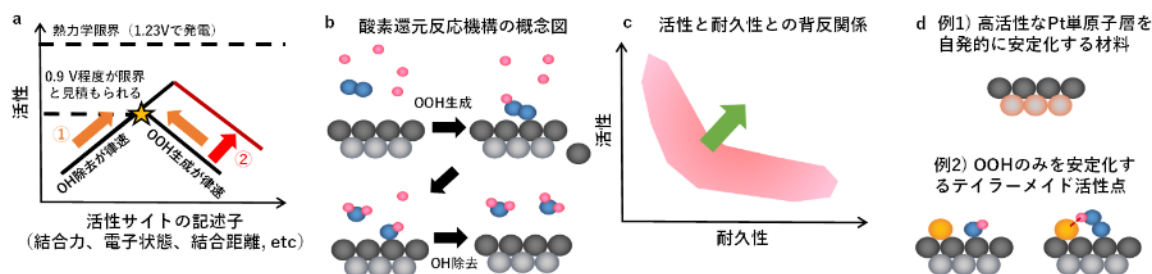


図 2.6.5-9 触媒材料の活性と安定性を向上するアプローチの考え方

アプローチ①:

- 材料構造と安定性・活性との間の隠れたパターンを紐解く解析
- データベース中の既存構造から有望な新構造を自動生成
- 材料の安定性・活性を予測するハイスループット計算
- 上記を支えるデータベース構築

アプローチ②:

- 電解質/ヘテロ界面サイトの活性予測技術
- 複合界面の全反応速度予測技術
- これらを支える高速・高精度計算技術 (機械学習・量子コンピューティング等)

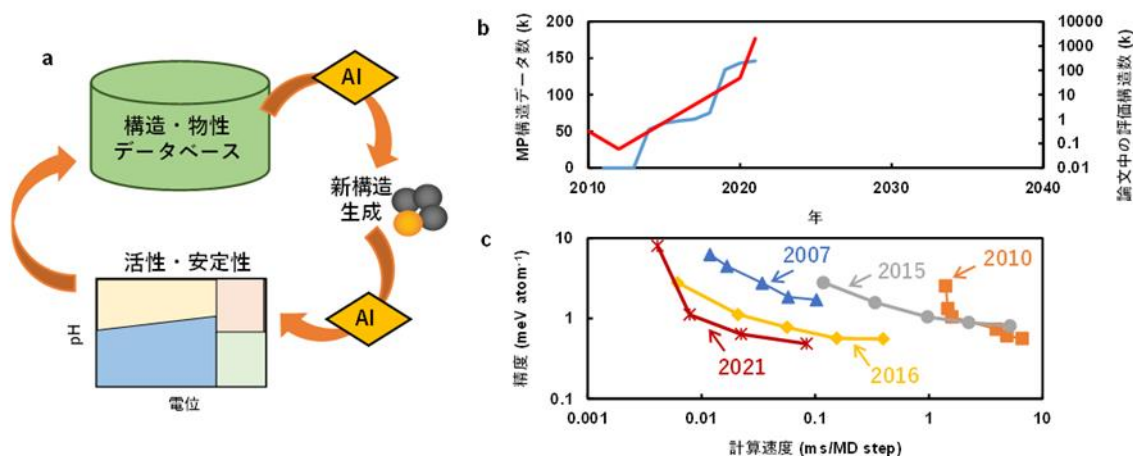


図 2.6.5-10 図 2.6.5-9 のアプローチ①・②を実現する上で重要と考えられる計算技術。b は Materials Project の公開情報[17]および各種文献[1, 19, 21]よりデータ取得。c は文献[38]よりデータ取得

以下では、Volcano plot を超えるためのシミュレーション技術の高度化について、現状と課題をもう少し詳しく述べる。Volcano plot の枠組みはそもそも、研究者の物理化学的直感をもとに単純化、理想化されたモデルに対する解析から導出された。これを超えるためには、電池動作中の触媒において、原子スケールで何がどうなっているのか、どのような素反応が電極反応を構成しているのかを、なるべく仮定を置かずにシミュレーションし、そこで得られた理解をもとに材料設計指針を探るというアプローチが重要となる。計算科学の見地からはこちらのほうが王道のアプローチと言えそうだが、PEFC の電極触媒開発においては Volcano plot ほどのインパクトが得られていない。その理由、および解決に向けた取組について以下に述べる。

【量子化学計算・第一原理計算の高精度化】量子化学計算や第一原理計算では、実用的な計算モデルサイズに対応するため、様々な近似が用いられている。室温付近の化学反応を定量的に議論するためには 1 kcal/mol 程度のいわゆる「化学的精度」が必要となるが、第一原理計算で現在用いられている密度汎関数近似ではこの精度に到達できていない。これを実現する実用的な近似手法の開発が求められている。例えば最近では、小分子の超高精度な波動関数計算データに対する機械学習によって汎関数近似の高精度化を図る方法が検討されている[39,40]。このような研究によってもたらされる高精度化は、トランススケールシミュレーション技術の開発と合わせて粗視化 MD、フェーズフィールド (PF)、格子ボルツマン法 (LBM) 等のマクロ階層のシミュレーションの高精度化をももたらすと期待される。

【定電位】電極反応の進みややすさは、電極触媒自体の構造や、反応物および生成物の分布、電気二重層など、電位によって変調を受ける反応場全体の構造に依存する。従って、電極反応が起こっている触媒をシミュレーションするためにはまず、実験の電極平衡に対応した反応場を用意す

る必要がある。しかし、通常の粒子数一定の分子動力学シミュレーションでは、今シミュレーションしている状況がどのくらいの電位に対応するかを知る術はそもそもない。これを解決するための方策として、電解質の分子統計モデル[41,42]や、化学ポテンシャル一定のもとでの粒子数変化を考慮可能なモンテカルロシミュレーション[43-47]との組み合わせが有望であると考えられる。このようにして電極平衡に対応する反応場が規定されると、マーカス理論などに基づく微視的運動論による正確な電流密度計算への展開も可能になる。近年のシミュレーション加速技術[5-13]や計算機科学の進展と組み合わせることで、電位を規定した平衡状態の電極反応場におけるマイクロ秒、サブマイクロメートルスケールの「全部入り」シミュレーションを実現することは、10~20年のタイムスケールではチャレンジングだが不可能ではない重要課題であろう。

【準安定状態・データ同化】一方、そもそも触媒材料は準安定状態を凍結して機能を引き出しており、触媒形成プロセスをまるごとシミュレーションできない限り、計算だけで触媒の構造を再現するのは無理である。そして、触媒形成は分から時間単位のプロセスであり、最長でもミリ秒までを守備範囲とする分子動力学計算からのアプローチは現実的ではない。欠陥を有する酸化物材料のような、高温焼成時の平衡状態が凍結されているような材料の場合は、ダイナミクスを無視して平衡状態の構造を直接探索するモンテカルロ法が有用であろう[48]。しかしこれは特殊なケースで、実触媒の構造は特定の温度の平衡状態と関連付けることは一般的にはできない。そこで期待されるのが、実験とのデータ同化である。現在様々なマイクロメートルからナノメートルスケールの実験プローブの高度化が進んでおり（現象・機構解明（解析）の記載を参照）、実験だけで原子スケールの触媒構造を完全に再構成できないにしても、様々な手がかりが得られるようになる。この部分的な情報とシミュレーションを組み合わせるデータ同化[49,50]によって構造モデルを構築する手法の高度化、一般化が必要となるであろう。また、マクロスケールの電気化学測定データとマイクロな電流密度シミュレーションを結びつけて微視的構造を明らかにするといったような、マクロスコピックなプローブに対応するデータ同化手法の開発も求められる。

【次元削減】「全部入り」原子スケールシミュレーションが実現したとして問題となるのが、そこからどのようにして応用の効く知識、あるいは活性に相関する記述子を引き出すかである。これはシミュレーションが複雑化、大規模化すればするほど難しくなっていく課題である。多数の粒子の一見不規則な軌跡からいかにして次元削減を行い、解釈可能な反応座標を引き出すのかについての研究はまだ始まったばかりであり[51,52]、その進展が望まれる。原子スケールのシミュレーション結果を、動的モンテカルロ法のような原子スケール描像を維持したメゾスケール計算やマイクロキネティクスモデル[53-55]に展開するためにも不可欠な要素技術である。

【耐久性】触媒や電解質の性能に加えて重要な要求要件として、耐久性が挙げられる。先述のとおり、機能材料は準安定状態をうまく凍結して機能を引き出しているわけで、この準安定状態が崩れていく様子、すなわち熱力学的平衡状態への緩和について知見を提供することも、計算科学に求められている。この点で、通常の分子動力学法では考慮できるタイムスケールと劣化速度との間に大きなギャップがある。一方、モンテカルロ法では考慮する自由度に対する熱平衡状態を高速に計算可能で、劣化によって行き着く先自体の情報は得られる可能性があるが、タイムスケールの情報は失われてしまう。劣化に繋がる素過程が想定できるのであれば、分子動力学法を基盤とした様々なレアイベントサンプリング手法がすでに考案されており[56,57]、材料設計による素過程のレート変化はある程度シミュレーション可能である。素過程に関する手がかりを得るた

めには、長時間にわたる変化を追跡できるようなナノスケール実験プローブの開発に期待したい。また、劣化に繋がる未知のレイイベントを効率的に探索するような計算手法開発[58]も望まれる。

②部材・製品・システムレベルにおける計算科学技術

表 2.6.3-1 のとおり、電解質のプロトン伝導率とカソード触媒の酸素還元活性との格段の向上は必須の課題である一方、触媒層や GDL・MPL およびセパレータを含むガス拡散抵抗も 2030 年の目標値と同レベルであるが、これらの部材は限界に近い設計が必須である。さらに、2040 年に向けた触媒・電解質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）も変わる可能性があり、それに伴い GDL・MPL やセパレータの構造・機械特性を含めてセル・スタック性能への影響を予測し、部材の最適化を加速するシミュレーション、さらには FCV および HDV のスタック性能・耐久性の要求に対してボトルネックとなる材料・部材特性と条件を迅速に抽出するための MBD (Model Based Development) による FC システムシミュレーションが鍵であり、メソ・マクロスケールにおける反応場と物質移動、伝熱、流体力学、構造力学、制御など、化学工学、機械工学等のエンジニアリング領域の知見を結集した技術開発が求められる。

メソ・マクロスケールにおけるシミュレーションの概念を図 2.6.5-11 に示す。触媒インク・触媒層形成プロセスの現象解析に基づく構造、液水挙動を考慮した触媒層、MPL および GDL の物質移動特性、セパレータ構造（流路形状）とセル・スタックの性能、さらに FC システムの予測まで時空間スケールの横断的に連結したモデリング・シミュレーション技術の高度化が必須である。前述の通り、触媒・電解質膜の材料によって、触媒層や GDL・MPL に求められる要件が変わる可能性があり、2.5.3 で説明したように、MPL、GDL の酸素拡散抵抗の低減に加え、触媒層内の酸素・プロトンおよび電子の物質輸送性能と電気化学反応に寄与する有効触媒表面の最適化が重要である。セパレータもセル・スタック性能向上に向けた多様な形状が提案されており、他の部材の構造と組み合わせも考える必要がある。

さらに、メソ・マクロスケールの性能・耐久性の影響因子として液水の存在が挙げられる。MPL、GDL の細孔内およびセパレータ流路内の液水滞留による酸素拡散の低下は性能に影響し、セパレータからの金属イオン溶出による電解質膜劣化への影響も受ける。さらに、上述のように触媒・電解質の新材料によっては触媒層自体の濡れ方が変わる可能性もある。2030 年および 2040 年の FC システム目標ではスタック冷却水出口の最高温度がそれぞれ 105°C、120°C で、電解質膜面温度はさらに 5°C~10°C 程度高いために液水が存在しない状態となりうるが、低負荷運転（通常の運転モードで大半を占める）や負荷変動時および氷点下起動時は液水が存在する。このため、性能・耐久性向上へのセル内の液水の構造・挙動と物質移動への影響の解明については継続して取り組むべき課題であり、気液二相あるいは気液固三相シミュレーションの期待は大きく、これらは水電解セルの気泡挙動解析にも共通した基盤技術となる。こうした混相流シミュレーションは LBM、PF や CFD の適用が活発であるが[59-62]、今後は、基材構造および表面濡れ性や相変化などの計算精度の向上、機械学習等を活用した計算高速化[63-65]の手法などの更なる技術開発が期待される。

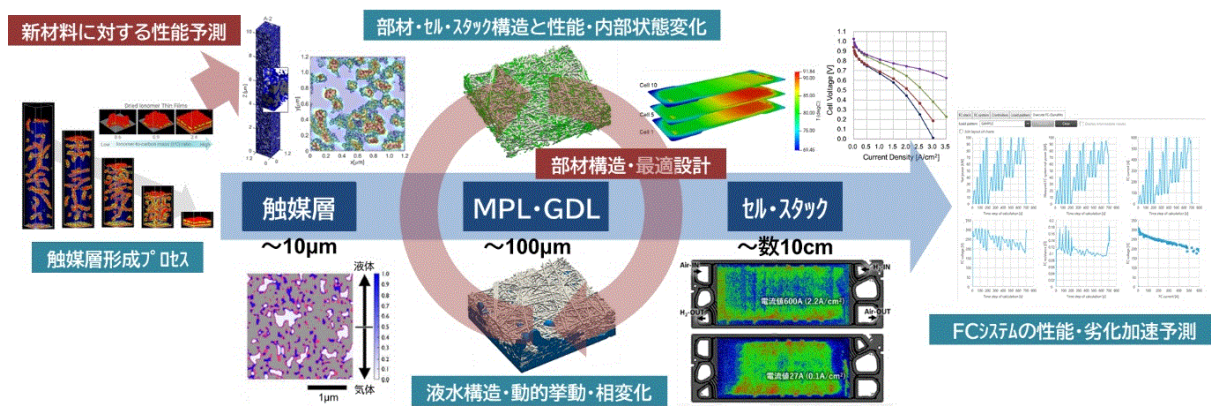


図 2.6.5-11 PEFC におけるメソ・マクロスケールシミュレーション

(参考文献)

[1] Nørskov et al., *J. Phys. Chem. B* **108**, 17886 (2004).
 [2] Rossmeisl et al., *J. Phys. Chem. B* **110**, 21833 (2006).
 [3] Muhammadiyah et al., *J. Phys. Chem. C* **126**, 15662 (2022).
 [4] Kulkarni et al., *Chem. Rev.* **118**, 2302 (2018).
 [5] Behler and Parrinello, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 146401 (2007).
 [6] Bartók et al., *Phys. Rev. Lett.* **104**, 136403 (2010).
 [7] Shapeev, *Multiscale Modeling & Simulation* **14**, 1153 (2016).
 [8] Jinnouchi et al., *Phys. Rev. B* **100**, 014105 (2019).
 [9] Batzner et al., *Nature Commun.* **13**, 2453 (2022).
 [10] Vandermause et al., *Nature Commun.* **13**, 5183 (2022).
 [11] Mikkelsen et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **24**, 9885 (2022).
 [12] Jinnouchi et al., *J. Chem. Phys.* **154**, 094107 (2021).
 [13] Jinnouchi et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **24**, 15522 (2022).
 [14] Hansen et al., *J. Phys. Chem. C* **118**, 6706 (2014).
 [15] Medford et al., *Catal. Lett.* **145**, 794 (2015).
 [16] Nagai and Okazaki, *J. Chem. Phys.* **157**, 054502 (2022).
 [17] <https://materialsproject.org/>; Jain et al., *APL Materials* **1**, 011002 (2013).
 [18] <https://opencatalystproject.org/>
 [19] Wang et al., *ACS Energy Lett.* **5**, 2905 (2020).
 [20] Kalhara et al., *ACS Energy Lett.* **5**, 3778 (2020).
 [21] Lee and Jinnouchi, *J. Phys. Chem. C* **125**, 16963 (2021).
 [22] Drautz, *Phys. Rev. B* **99**, 014104 (2019).
 [23] De et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**, 13754 (2016).
 [24] Bartók et al., *Sci. Adv.* **3**, e1701816 (2017).
 [25] Huang and Lilienfeld, *Chem. Rev.* **121**, 10001 (2021).
 [26] Deringer et al., *Chem. Rev.* **121**, 10073 (2021).
 [27] Darby et al., *npj Comput. Mater.* **8**, 166 (2022).

- [28] Willatt et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20**, 29661 (2018).
- [29] Mahoney and Drineas, *PNAS* **106**, 697 (2009).
- [30] Imbalzano et al., *J. Chem. Phys.* **148**, 241730 (2018).
- [31] Oganov and Glass, *J. Chem. Phys.* **124**, 244704 (2006).
- [32] O'Boyle et al., *J. Cheminformatics* **3**, 33 (2011).
- [33] Curtarolo et al., *Phys. Rev. Lett.* **91**, 135503 (2003).
- [34] Fischer et al., *Nature Mater.* **5**, 641 (2006).
- [35] Wang et al., *Phys. Rev. B* **82**, 094116 (2010).
- [36] Patel et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21**, 35323 (2019).
- [37] Greeley et al., *Nature Materials* **5**, 909 (2006).
- [38] Lysogorskiy et al., *npj Comput. Mater.* **7**, 97 (2021).
- [39] Nagai et al., *npj Comput. Mater.* **6**, 43 (2020)
- [40] Kulik et al., *Electron. Struct.* **4**, 023004 (2022)
- [41] Nishihara and Ohtani, *Phys. Rev. B* **96**, 115429 (2017).
- [42] Haruyama et al., *Phys. Rev. Mater.* **2**, 095801 (2018).
- [43] Takenaka et al., *J. Phys. Chem. C* **118**, 10874 (2014).
- [44] Suzuki and Nagaoka, *J. Chem. Phys.* **146**, 204102 (2017).
- [45] Kasamatsu and Sugino, *J. Phys.: Condens. Matter* **31**, 085901 (2019).
- [46] Kasamatsu et al., *J. Chem. Phys.* **157**, 104114 (2022).
- [47] Nagai and Okazaki, *J. Chem. Phys.* **157**, 054502 (2022).
- [48] Kasamatsu et al., *J. Mater. Chem. A* **8**, 12674 (2020).
- [49] Adachi et al., *Comput. Phys. Commun.* **241**, 92 (2019).
- [50] Gereben and Pusztai, *J. Non-Cryst. Solids* **407**, 213 (2015).
- [51] Mendels et al., *J. Phys. Chem. Lett.* **9**, 2776 (2018).
- [52] Bonati et al., *J. Phys. Chem. Lett.* **11**, 2998 (2020).
- [53] Henkelman and Jónsson, *J. Chem. Phys.* **115**, 9657 (2001).
- [54] Stamatakis and Vlachos, *ACS Catal.* **2**, 2648 (2012).
- [55] Reuter, *Catalysis. Lett.* **146**, 541 (2016).
- [56] Valsson et al., *Annu. Rev. Phys. Chem.* **67**, 159 (2016).
- [57] Sprik et al., *J. Chem. Phys.* **109**, 7737 (1998).
- [58] Hirai and Jinnouchi, *RSC Adv.* **12**, 23274 (2022).
- [59] Shimpalee et al, *J. Electrochem. Soc.* **166**(8), F534 (2019).
- [60] Niblett et al., *J. Power Sources* **555**, 232383 (2023).
- [61] Tardy et al., *Int. Heat and Mass Trans.* **145**, 118720 (2019).
- [62] Zhou et al., *J. Power Sources* **437**, 226933 (2019).
- [63] Vinuesa et al., *Nature Comput. Sci.* **2**, 358 (2022),
- [64] Wang et al., *J. Comput. Phys.* **466**, 111419 (2022).
- [65] Qiu et al., *Phys. of Fluids* **34**, 052109 (2022).

2.6.6 人材育成

前節までに技術革新による 2040 年頃までの達成シナリオを整理してきたが、目標達成においては研究開発を担う人材の育成も重要な観点であり、本節では人材育成ついでの方を整理する。

技術革新による 2040 年目標達成に必要な人材としては、現状技術の究極や原理原則を追求することでイノベーションを実現する研究者、個別の要素技術を融合しセルやスタックとしての性能目標を達成する研究者・技術者などが必要となると考えられるが、何よりも燃料電池分野における研究者をいかに確保するかが第一の課題である。図 2.6.6-1 に示す通り、主要国において博士号取得者数が減少傾向にあるのは日本のみであり、図 2.6.6-2 や図 2.6.6-3 に示す通り燃料電池分野における論文掲載件数や特許出願件数においても燃料電池研究における日本の優位性が相対的に低下している傾向の中で、研究人材をいかに確保するかが喫緊の課題であると言える。

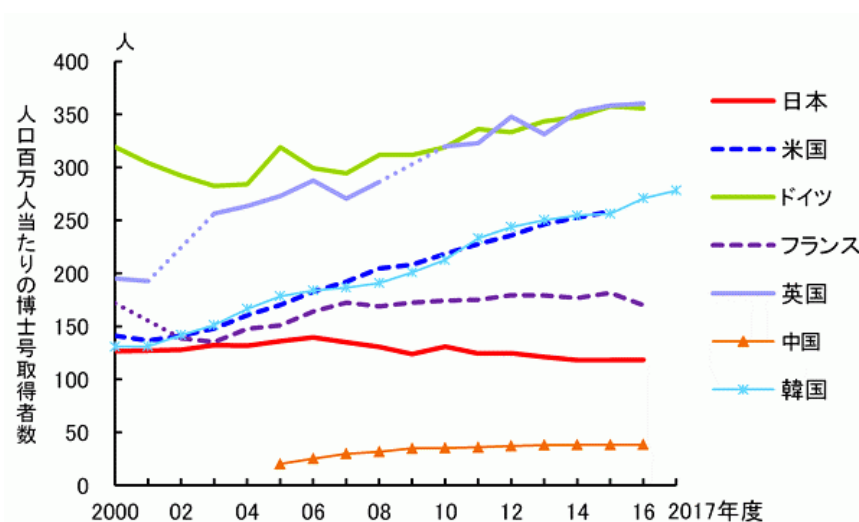


図 2.6.6-1 人口百万人当たりの博士号取得者数の国際比較 [1]

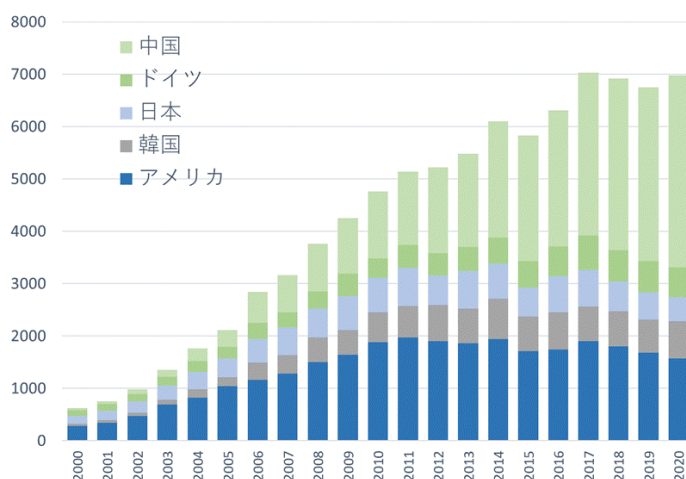


図 2.6.6-2 燃料電池関係の論文数推移の国際比較 [2]

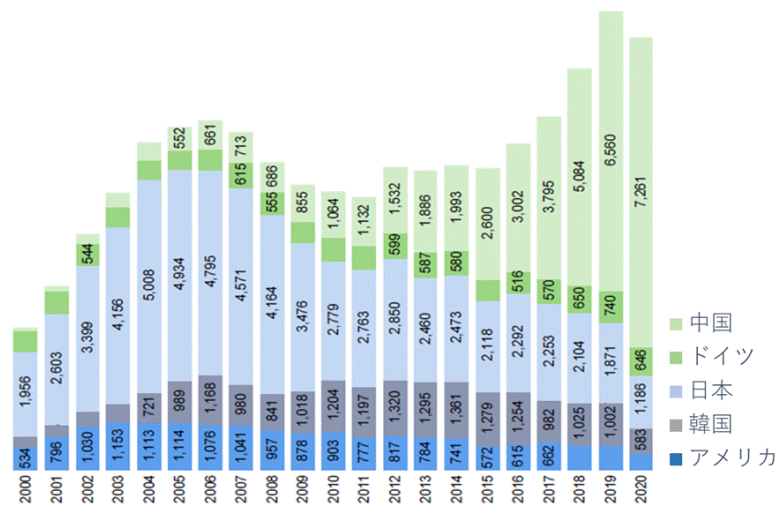


図 2.6.6-3 燃料電池関係（輸送分野）の特許出願件数の国際比較 [3]

燃料電池分野における研究人材の確保には短期的ではなく中長期的視点で考える、すなわち若手の研究人材をいかに増やし、いかに燃料電池に興味を持ってもらい研究に継続的に取り組んでもらえるかが重要な観点であり、以下に示す方策を産官学が一体となり検討することが望まれる。

- 高校/学士/修士課程の若い時期から水素や燃料電池に触れる機会の創出
- 博士課程や博士取得後の異分野経験などを含めた研究人材の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や国際人材流動・還流

燃料電池の性能向上には 2.5 節、2.6 節で示した通り、電解質膜・空気極触媒層・燃料極触媒層・空気極流路/GDL・燃料極流路/GDL・セパレータなど専門分野の異なる多くの個別構成要素それぞれの特性を向上させるだけでなく、これらの個別構成要素を組合せ、発電という機能をいかに設計していくかも重要であり、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・機械工学といった複数の専門野融合によるチーム型研究を進める仕組みと、バックキャストで俯瞰的・統合的なチームマネジメントができるプログラムダイレクターの育成も重要な課題と考える。この俯瞰的・統合的な考え方ができる人材の育成のためにも、前述した研究人材のキャリアパス整備にあたって、博士課程や博士取得後の異分野経験は効果的と考える。

また日本の特徴として人材流動性の低さが挙げられる。例えば図 2.6.6-4 に示す通り、日本の理系博士課程修了者は 58%が大学に就職し民間企業等に就職したのは 36%であるのに対し、米国の博士課程修了者の雇用先は民間企業等が 56%であり日本とは対照的である。産官学一体となって活動した本ロードマップの検討を通じて、トラック・船舶・鉄道・建機・産業機器・農機といった産業界における製品開発・燃料電池システム研究開発とアカデミアにおける材料研究をシームレスに繋ぐことが極めて重要であることを再認識したが、産官学での人材のフレキシブルな流動も以下の観点から人材育成に対して有効と考える（図 2.6.6-5）。

- 学から産（サバティカル）：開発現場のリアルな技術課題の理解、製品・システム目線感覚の学び
- 産から学（社会人博士）：産業界知見のアカデミアへの伝承、研究者としての学びなおし
- 産学連携のクロスポイントメント：知恵や設備の有効活用による研究加速

日本と米国の博士課程就職者の就職先

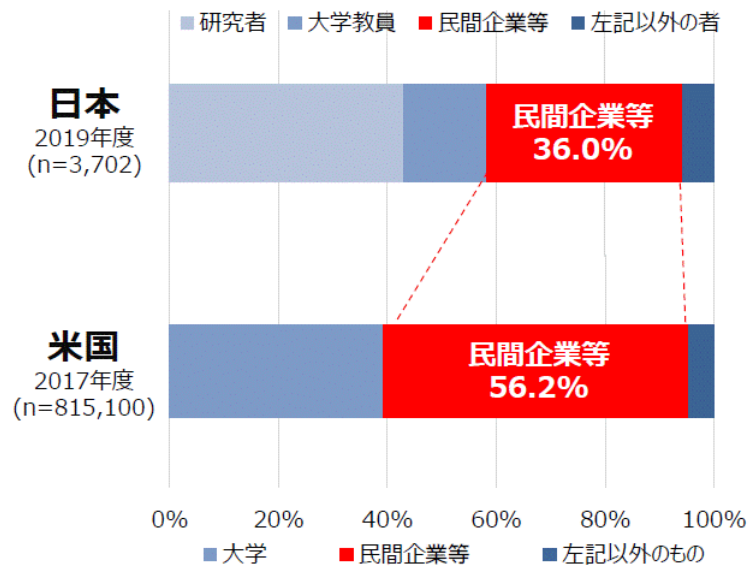


図 2.6.6-4 日本と米国の博士課程就職者の就職先 [4]

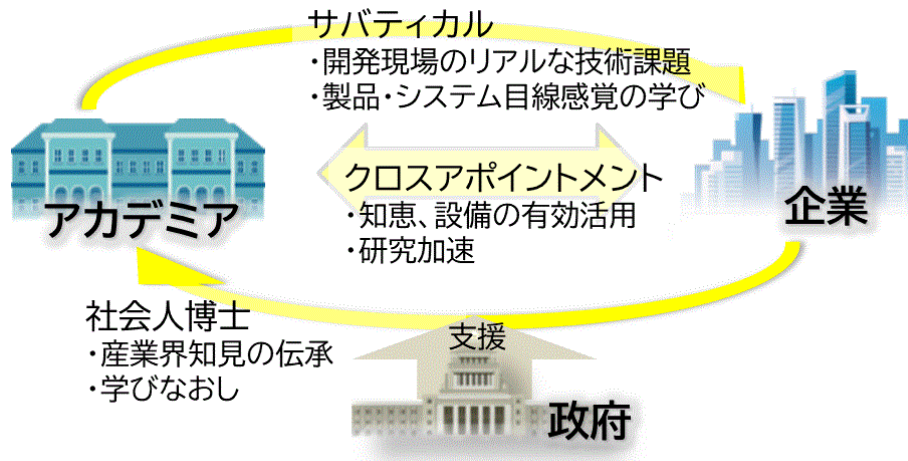


図 2.6.6-5 産官学連携・人材流動による研究者育成

(参考文献)

- [1] 科学技術・学術政策研究所 “学位取得者の国際比較”, 2019
https://www.nistep.go.jp/sti_indicator/2021/RM311_34.html
- [2] Google Scholar より当社作成
- [3] World Intellectual Property Organization “Patent Landscape Report, Hydrogen fuel cells in transportation, 2022”より当社作成
- [4] 経済産業省 第2回未来人材会議, 2022

2.7 FC 生産技術

2.7.1 生産能力の推移予測とライン原単位の考え方

経済産業省（METI）「水素・燃料電池戦略ロードマップ」における目標として、FCV の累積普及目標 80 万台（2030 年）が提示された。この目標を達成するためには、今後、国内の燃料電池スタックの製造能力を段階的に拡大してゆく必要がある。図 2.7.1-1 に、2030 年までに生産量を最小限 20 万台/年とするシナリオを置いた。累積普及台数は、2030 年時点で約 80 万台到達が見通せる生産規模を設定した。本検討では、20 万台/年を念頭に、目標とするタクトタイムの検討を行った。

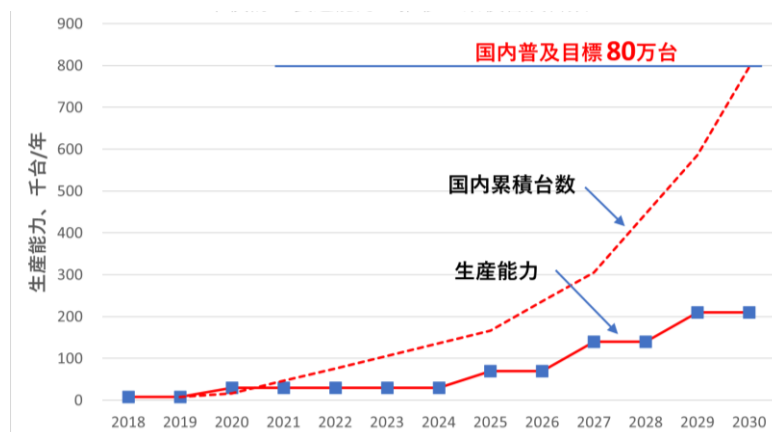


図 2.7.1-1 生産能力推移予測と累積普及台数（試算）

2030 年頃の生産規模を想定することにより生産速度目標を設定し、生産技術的な課題を明確にする狙いである。

工場建設の計画は、個社の事業計画によるものであり、あくまで国の普及目標を達成するために必要な生産能力を逆算したものである。背景として、FC 市場が順調に成長していくことが前提である。図 2.7.1-2 に直近の各国のプロジェクトにおける 2030 年頃の FC の生産計画をプロットした。ドイツ、フランスおよび韓国も 2030 年で、年産 20 万台以上の生産規模を想定している。

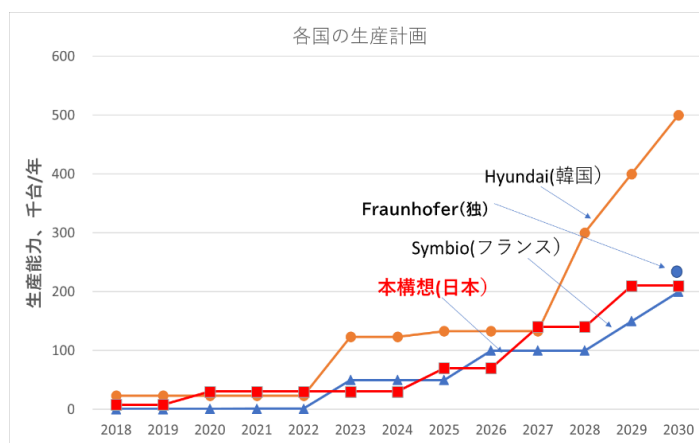


図 2.7.1-2 各国の燃料電池スタックの生産計画

ここで、年産 20 万台には、FCV に HDV の生産量を加算した生産量を想定している。当面 FCV

生産ラインで、HDV のセル・スタックの作り分けを行う前提とした。ロードマップに示したように、HDV の本格普及は 2030 年以降と予想され、セルの生産数量の HDV の占める割合は FCV の 15%程度と少量である（表 2.7.1-1）。当面は、HDV 専用工場を建設せず、FCV の生産ラインで作り分けをする方が、コスト的に有利となる。可能な限り部品の仕様は統一し、耐熱温度、耐久仕様が異なる HDV 仕様の電極のみ作り分け、その他の工程は FCV と同じラインでセル・スタックを製造することによりコストアップを最小限に抑えることが可能と思われる。

表 2.7.1-1 FC スタック生産規模試算前提

項目	目標値	スタック熱定格出力セル数、セル面積、基数
FCV 乗用導入前提	200,000 台/年 水素・燃料電池ロードマップ	115kW 330 セル、273cm ² ×1 基 66 百万枚/年
25トンクラス HDV 導入前提	国内 10,000 台/年 ※表 2.1.1-1 参照	228kW 330 セル、273cm ² ×2 基 6.6 百万枚
44トンクラス HDV 導入前提	国内 1000 台/年 ※表 2.1.1-1 参照	383kW 330 セル、273cm ² ×4 基 1.3 百万枚

※FC HDV のグローバル生産の予測から国内 20%程度の生産量を推定

2.7.2 生産速度の目標とタクトタイムの考え方

タクトタイム（TT）の目安は、枚葉工程 0.5 秒/セル、連続工程 15m/分とおいた。

セル面積 273cm²、330 セルの仕様のスタックを年産 7 万台規模（月 6,000 台）の製造工場です直体制の前提で枚葉工程と連続工程のライン速度の試算値に近い値とした。

試算前提が異なれば、セルサイズ、セル数、歩留まりにより TT は幅をもつ。現状の 2 倍から 4 倍の生産性となるので、厳しめの目標値を置いている。後述する加工コストの目標を達成するためには、設備コスト低減もさることながら、生産性をアップする方が、加工費低減の効果が大きい。

ラインの規模を小さくすると、TT は大きくなり生産技術的には楽になるが、加工費は増大する傾向にある。一方、ライン原単位を 10 万台規模に大きくしても枚葉工程の生産速度の限界を超えると結局各工程で複列化して量産の効果は得にくくなる。TT は、0.5 秒程度が妥当と思われる。

下図のように、各国のプロジェクトの想定サイクルタイムも、0.5～1.0 秒/セルを想定されている。想定されるライン当たりの生産規模、日当たりの稼働時間によって TT は異なる。

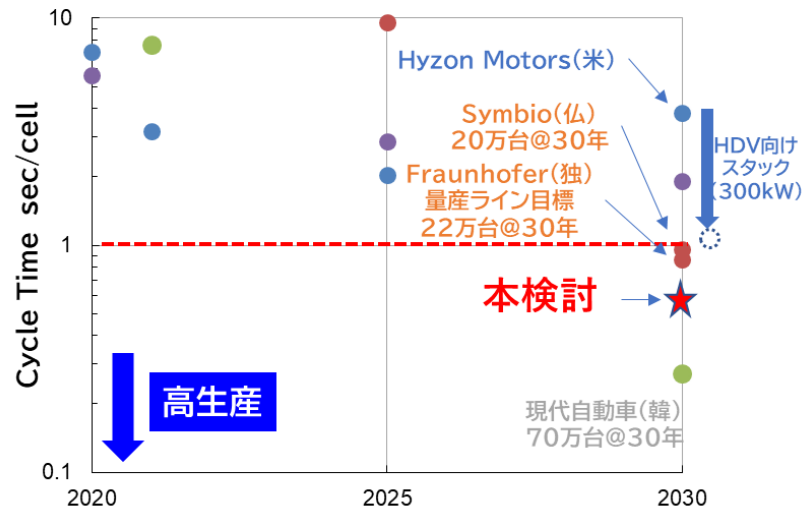


図 2.7.2-1 各国プロジェクトの目標サイクルタイム

2.7.3 スタックコスト目標 材料コストと加工費

METI の水素・燃料電池戦略目標および DOE 試算を前提に FC システムコストおよび FC スタックコストの目標値を表 2.7.3-1 のように定めた。

図 2.7.3-1 に DOE 試算の現状と将来コストの目標値を示す。本検討では、この試算結果をもとに材料および加工費の低減目標を提示した。コスト目標達成のために、材料コストおよび加工費ともに 70%程度削減が必要であり、厳しい目標設定となっている。触媒、アイオノマ、電解質膜、GDL、BPP の材料コスト低減とともに、製造設備の生産性、スペース効率の向上、工程の短縮、工程の削減を図り全体の設備投資の低減を図る取り組みが必要である。

表 2.7.3-2 にこれまでの、生産技術目標をフェーズ毎にまとめた。将来の生産ラインを検討する上では LCA を考慮したモノづくりを行う必要があることは言うまでもない。工場で消費するエネルギーをグリーンエネルギーにすべて置き換える前提とした。合わせて、有機溶媒等の揮発成分の低減、副資材の削減・リサイクル、発電検査における水素の消費低減などの取組が重要である。

表 2.7.3-1 FC システム／スタック目標値

項目	目標値	備考
耐久時間 [h]	50,000	※2.2.2 項参照
FCV FCシステムコスト[万円/kW]	0.4	※2.3.1 項参照
FCV FCスタックコスト[万円/kW]	0.2	※2.3.1 項参照
HDV FCシステムコスト[万円/kW]	0.9	※2.3.1 項参照
HDV FCスタックコスト[万円/kW]	0.45	※2.3.1 項参照
Pt 目付量 [mg/cm ²]	0.24	※2.4.1 項参照 カソード: 0.2mg/cm ² アノード 0.04mg/cm ²
Pt 使用量 [g/kW]	0.19	Pt 使用量は大型トラックの熱定格参照

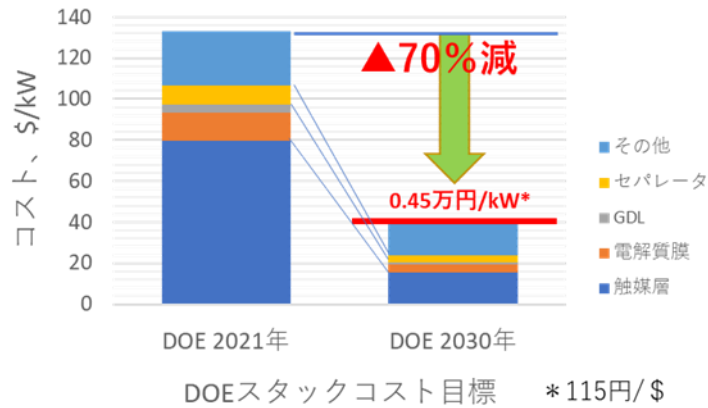


図 2.7.3-1 DOE 試算によるスタック目標コスト※1

※1 NEDO 燃料電池技術開発ロードマップ—HDV 用燃料電池ロードマップ（解説書）

表 2.7.3-2 FC 生産技術目標一覧

	現在	2025 年頃	2030 年頃	2040 年	2050 年頃
普及シナリオ (FC HDV)	国内 数百台	【FCHDV の初期導入段階】		【FCHDV 本格普及段階】	【CN 実現時期】
HDV コスト目標			FC システム FC スタック	0.9 万円/kW ※1 0.45 万円/kW	グローバル 10 万台、国内数万台 グローバル 1500 万台※2
普及シナリオ (FCV)	国内 7,500 台	【初期導入段階】【FCV 本格普及段階】 国内 20 万台 ※3		【FCV CN 達成時期】 国内 80 万台 ※3	国内 300-600 万台 ※4
FCV コスト目標			FC システム FC スタック	0.4 万円/kW)※1 0.2 万円/kW	
製造能力目標 HDV+FCV※	3 万台/年 (公表値)		7 万台/年	21 万台/年	→ 50 万台/年
ライン原単位 (想定規模)	2,500 台/月	→ 6000 台/月 ×1 か所		6000 台/月 ×3 ヵ所程度	1 万台/月 ×複数ヵ所
生産速度 (タクトタイム)	枚葉工程 1 秒/セル※6 連続工程 6m/分※7			0.5 秒/セル※6 15m/分※7	0.3 秒/セル※6 20m/分※7
加工費低減目標 材料費低減目標	100% 100%			▲70%※5 ▲70%	
工場の消費エネルギーグリーン化	50%程度			80%	100%達成

※1 NEDO 燃料電池技術開発ロードマップ—HDV 用燃料電池ロードマップ（解説書）

※2 Hydrogen Council 「Hydrogen Scaling up」等に基づいた推計値

※3 METI 水素・燃料電池戦略ロードマップ

※4 FCCJ（燃料電池実用化推進協議会）が 2015 年公表の IEA 「Technology Roadmap Hydrogen and Fuel Cells」を参考に策定した目標台数（2050 年の目標である温室効果ガス排出量 80%削減に貢献すべく設定した数値、大幅な技術進展を期待したバシナリオでは 600 万台）

※5 DOE Mass Production Cost Estimation of Direct H2 PEM Fuel Cell Systems for Transportation Applications:2018 Update 2025 年

現在コストと 2030 年コスト予測値の比率、材料費と加工費とも同率で 70%低減する前提

※6 スタック仕様 125kW、300 セル、電極面積 250cm²、20 日稼働、2 直生産

※7 試算の仮定 電極面積 250cm² 幅 320×130mm で*3 稼働条件で製造した場合

2.7.4 生産技術課題

図 2.7.4-1 に、一般的な FC 製造ライン工程を示す。また、図 2.7.4-2 には重ねて現状の技術課題をした。現状では、高価な材料のロスが大きく、電極の塗工工程、セル化工程、セパレータ加工、表面処理の加工時及びエージング工程に長時間を要している。このまま生産規模を増やしても膨大な設備投資と工場スペースを要することになる。

前述のようにコスト目標を達成するためには、高価な材料の歩留まりを上げ、工程全体の大幅な生産性の向上を図る必要がある。各工程において工法の技術革新が求められる。

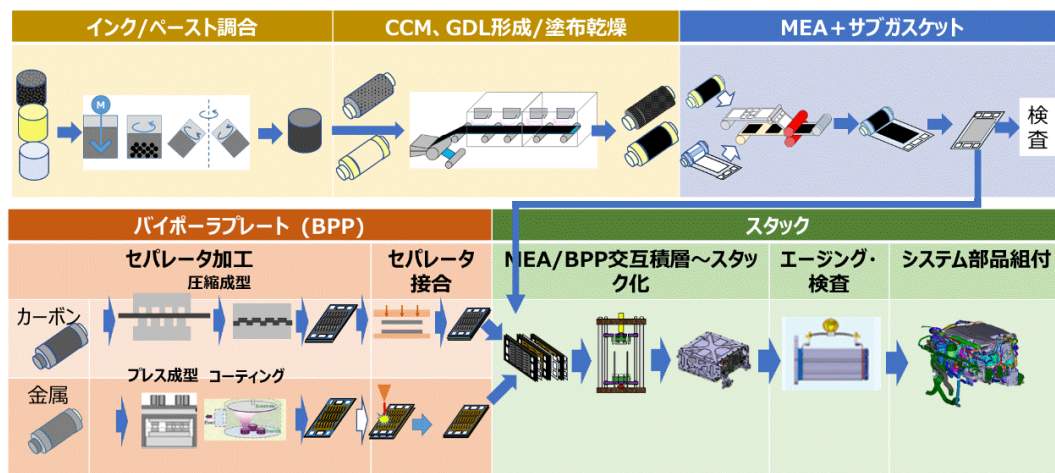


図 2.7.4-1 燃料電池スタック生産工程

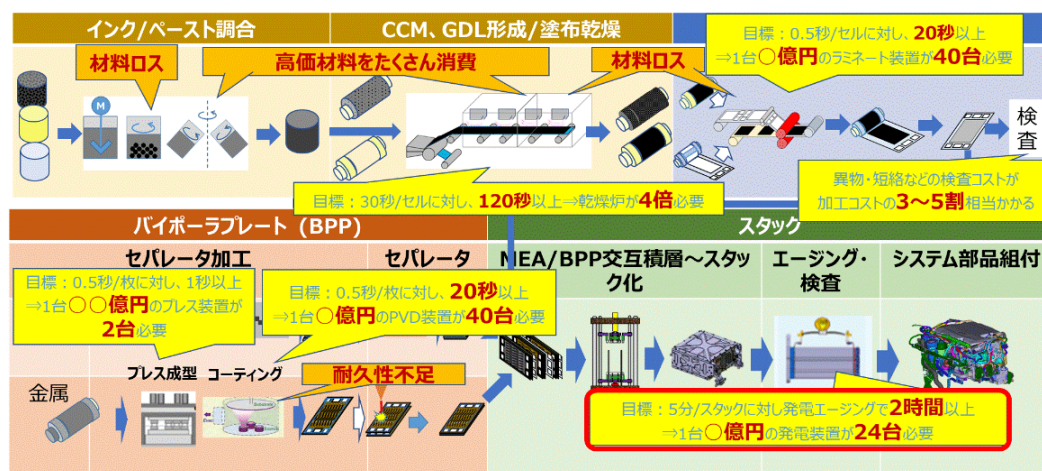


図 2.7.4-2 燃料電池スタック生産工程 現状と課題

表 2.7.4-1 に主要工程ごとの開発のポイントと目標とする指標 (KPI) を示した。また表 2.7.4-2 に工程ごとの具体的取り組み課題をフェーズ毎にまとめて示した。

(1) 触媒調合塗工乾燥工程 MPL 調合塗工乾燥工程

本工程は、セル・スタックの性能を決める重要な工程であり、品質の高い塗布層を製造する必要がある。触媒粒子の凝集体 (ダマ) やひび割れがあると性能や耐久性に影響する。また、触媒、電解質等の高価な材料を取り扱うために、歩留を向上する取り組みが必要である。乾燥工程が生産速度上のネックであり乾燥のための熱エネルギーを要する。現在のところ、

良好な触媒層の製造条件は経験によるところが大きく、触媒インクの性状と塗工乾燥を経て得られる触媒層構造と性能の関係が把握されていない。

実プロセスの可視化解析とシミュレーション、PI 技術を組み合わせることで理想的な触媒層構造を制御可能とする原理の把握および具体的手法の開発触媒層形成プロセスの最適化の取組が必要である。また乾燥条件の最適化による乾燥工程の短縮化、乾燥レス化工法の検討も望まれる。

(2) MEA 化・セル化工程

本工程は、セル・スタックのシール信頼性・耐久性を確保する重要な工程である。使用する接着剤には、高い耐久性と十分な接着強度が求められる。触媒を被毒する揮発成分、溶出成分が極力含まないことを考慮する必要がある。また、MEA と樹脂フレームの接合、ガスケットの成形、ガスケットの貼付等時間のかかる工程が多いため生産性向上が困難である。

今後も接着剤の改良に取り組む必要がある。工法面でも、薄く柔らかい材料を高速で把持・搬送し高い位置決め精度が設備に求められる。

(3) バイポーラー流路形成工程

流路の形状・パターンが、燃料、酸化剤ガスの供給、発電分布、排水性に大きく影響する。FCV/HDV は、小型軽量化に有利なため、金属セパレータが採用されている。金属セパレータへ高精度な流路を形成する工法の開発が必要である。さらなる性能向上を図るためには、流路は、ファインピッチ化していくものと予想される。プレス成型では、加工サイクルの向上と金属金型の低減により低コスト化を図る取り組みが必要である。しかし、金属伸びの限界のため、今後、プレスに替わる低コスト・高速流路形成技術の探索が必要である。基材も金属とカーボン系の材料との複合化も予想され、それに対応する技術開発も必要である。

(4) 表面処理

今後、HDV では、耐久 5 万時間が要求される。金属セパレータの基材と導電性表面処理においては、さらなる耐腐食性、低接触抵抗の維持機能が求められる。現在、SUS 基材あるいはチタン基材へのカーボンの薄膜コーティング (PVD、CVD 等) の適用が検討されている。高真空プロセスであるためにコストアップとなっている。低真空 CVD 等の採用か、高価な真空装置を用いない表面処理技術の探索が必要である。

(5) エージング

エージングは、スタック組付け後、発電検査装置を用いて発電することにより①セル中の電解質を湿潤させてプロトン抵抗を下げるプロセスと②触媒表面に付着したコンタミ成分を洗浄除去するプロセスを同時に行う工程である。通常、数 10 分から数時間を要するため多大なコストを要する。月 6,000 台規模の生産ラインにおいては、タクトタイムは、約 3 分/台となるのでエージングに 60 分かかるとすると 100kW 級の発電検査装置が 20 台必要となり多大な設備投資、多大な燃料、電力が必要になる。

今後、コンタミ付着要因の特定や電解質湿潤メカニズム解明を図りつつ、エージング処理時間の短縮、発電検査時の水素消費低減につながる効率的な手法を開発して、エージング工程のコストを低減する取り組みが必要である。

(6) 品質検査

現状では、部品の個々の欠陥検査とともに、工程ごとに種々の検査を行って品質を確保している。特に MEA 中の金属異物検査、短絡検査、リーク検査（セル、スタック、出荷前）、スタック発電検査、目視検査等の多くの検査が必要である。今後、生産性を上げるためには検査工程の簡素化、レス化の取組が必要である。とりわけ、金属異物の検出精度を上げる必要がある。

表 2.7.4-1 工程ごとの開発のポイントと目標 KPI

工程	革新の主眼/開発のポイント (協調して開発を進めたい課題)	工程の目標 KPI (ロードマップに記載)
触媒調合 触媒塗工乾燥 MPL 塗工乾燥	高品質塗工面の形成技術の確立 ダマのない均一分散促進 脱泡時間短縮 塗工欠陥・カスレなし 乾燥エネルギー・排风量減 Pt・アイオノマ利用率向上	①粒径<3μm、ろ過歩留>99.9% ②脱泡混錬時間 従来法▲70% ③塗面欠陥なきこと(ダマ、ひび) ④触媒層気孔率 >65% ⑤乾燥エネルギー▲70% ⑥排风量▲70% ⑦ Pt 歩留 >98%
MEA 化・セル化	セルのシール信頼性の確保 RtoR 貼合の高速・高精度化 型レス、使い捨て材レス	①位置精度±0.5 mm@50m/分 ②裁断加工費 ▲70% ③搬送加工費 ▲70%
流路形成	高性能流路形成技術の確立 印刷・3DP 活用 簡素なプレス加工 型費削減	①リップ高さ 300μm@0.5 秒/セル ②成型荷重▲70% ③型製作費▲70%
表面処理	低コスト高耐久表面処理技術の確立 真空蒸着からの脱却	①表面処理時間短縮 10 秒/枚 →電力▲80% ②設備投資▲80%
エージング	エージング工程の短縮化 レス化 セル製造工程における触媒被毒抑制とプロトンパス形成促進	①エージング時間<5 分 ②設備投資額▲80% ③湿潤工程 <5 分 ④検査用 H2 ガス使用量▲80%
品質検査	製造プロセス品質管理の最適化 レス化	①検査項目▲70% ②リーク検査時間▲70% ③金属異物検出感度 アップ

表 2.7.4-2 工程ごとの取り組み課題

	現在～5年	2025年頃	2030年頃
工程	シーズの確立	要素技術開発	実用化技術開発
触媒調合 触媒塗工乾燥 MPL 塗工乾燥	<ul style="list-style-type: none"> ・イオノマ分散状態の定量 ・触媒インク構造の計測技術探索 ・インク調整条件の PI、AL 手法適用 	<ul style="list-style-type: none"> ・触媒インクの均一分散技術 ・インクの静的・動的特性の制御 ・触媒層マイクロ構造制御手法の開発 ・インク物性計測技術(インライン) ・連続インク製造技術 ・PI、AL による塗工乾燥条件の最適化 ・乾燥レス化工法の検討(ドライプロセス) 	<ul style="list-style-type: none"> ・インク調合工程の最適化 ・乾燥工法、乾燥レス化工法の確立 ・量産プロセスの検討 ・量産設備開発
MEA 化・セル化	<ul style="list-style-type: none"> ・シート接合 ・コンバーティング ・電極端部シール ・セル内部シール ・セル間シール ・高速硬化接着剤 ・WEB ハンドリング ・PI、AL 手法探索 	<ul style="list-style-type: none"> ・高速把持・位置決め技術 ・界面接合の高速接合と接着性の両立 ・MEGA 端部シール工法 ・セバ基材・フレーム接合法 ・接着剤塗布工法 ・乾燥条件の最適化 ・乾燥レス化工法の検討 	<ul style="list-style-type: none"> ・高速電極シール工法 ・高速セル化工法開発 ・セル間シール工法 ・量産プロセスの検討 ・高速ハンドリング ・高精度位置決め、加圧加熱工法 ・量産設備開発
流路形成	<ul style="list-style-type: none"> ・高精度プレス ・高速プレス ・3D プリンター ・スクリーン印刷 ・メタル＋カーボン複合材料 	<ul style="list-style-type: none"> ・高精度高速プレス加工技術 ・新規微細パターン流路形成技術 ・表面親水撥水制御技術 ・表面性状計測技術(接触抵抗、欠陥検出) ・カーボン連続成型プロセス 	<ul style="list-style-type: none"> ・高速・高精度プレス工法開発 ・革新的流路形成技術 ・量産プロセスの検討 ・高速ハンドリング ・高精度位置決め、 ・量産設備開発
表面処理	<ul style="list-style-type: none"> ・基材＋表面処理材料探索 ・耐食性評価プロトコル ・低真空表面処理 ・連続表面処理 	<ul style="list-style-type: none"> 高耐久・低抵抗表面処理技術 低真空 CVD 表面親水撥水制御技術 表面性状計測技術(接触抵抗、欠陥検出) シール材料との接合強度の確保 	<ul style="list-style-type: none"> ・新規表面処理工法開発 ・革新的表面処理技術 ・高速ハンドリング ・高精度位置決め、 ・表面欠陥検出技術 ・量産設備開発
エージング	<ul style="list-style-type: none"> ・電解質湿潤工程 ・触媒クリーニング ・コンタミ成分分析 	<ul style="list-style-type: none"> ・触媒コンタミ成分の付着要因の特定 ・コンタミ付着形態観測技術 ・電解質湿潤メカニズム解明 ・触媒クリーニング工法 ・コンタミ付着低減プロセス 	<ul style="list-style-type: none"> ・触媒クリーニングプロトコル確立 ・低コンタミ接着剤、材料適用 ・発電検査装置の低コスト化 ・オンボードエージング
品質検査	<ul style="list-style-type: none"> ・異物金属検査方法 ・表面処理欠陥計測 	<ul style="list-style-type: none"> ・高速異物金属検査技術の開発 ・MI・PI によるプロセス管理項目・検査項目の最適最小化 ・高速リーク検査技術 	<ul style="list-style-type: none"> ・量産設備回被圧

2.8 水素貯蔵技術

2.8.1 技術開発課題（高圧水素）

（1）新材料開発

【革新炭素繊維】

現在主流である PAN 系繊維を原料（もしくは前駆体）とする炭素繊維の性能・強度を維持しつつ、原料コスト、焼成エネルギーを削減による低コスト化が可能な材料を素材とする革新炭素繊維の開発が進められており、その進捗が待たれる。

この革新低コスト炭素繊維は 2025~30 年の間に汎用グレードの繊維の強度から更なる高強度化を目指したい。

また、更なる繊維使用量削減を狙った、同革新低コスト炭素繊維の高品質化による 10GPa 級超高強度化につなげる。

また、10GPa の強度目標値は難易度が高い目標であるので、革新低コスト高強度繊維開発の経過を見ながら、継続して検討が必要である。

CNT 等の高強度短繊維についても、複数の使用法が想定される。例として、①母材に分散させて強化材として使用する、②撚糸状に連続線維化して使用する、などがあるが、コンポジットの高強度化に対する具体的な適用法は明確になっておらず、研究が必要な領域と考える。

今後、カーボンニュートラルへの対応は必須となってくると考えられる。

【カーボンニュートラル樹脂】

現在は、高圧タンク用マトリクス樹脂は分解しにくいエポキシ樹脂が多く用いられており、欧米では熱可塑樹脂化の研究も進められている。

今後 2030 年以降を目指したマトリクス樹脂開発の際に、マテリアルリサイクル可能またはカーボンニュートラルな樹脂材料開発が必要である。

【カーボンニュートラル繊維】

FRP 用の強化繊維についてもカーボンニュートラル化が必要である。2040 年に向けて、マテリアルリサイクル可能またはカーボンニュートラルな繊維の開発を基礎研究レベルから実施する。

（2）既存 FW 構造/製法のレベルアップ

図 2.4.1-1 に示したように現行の従来 FW 構造/製法の CFRP 製高圧タンクは約 2/3 の炭素繊維に強度余裕があることが知られている。

2023 年、2024 年にそれぞれ改定予定の gtr13 及び UN R134 の新規制（初期破裂安全率の 2.25 → 2.0 への適正化）に適合することに加え、構成部品形状の適正化と製造バラツキの低減を含む最適 CFRP 積層を産学で明らかにする。

また今後、熱硬化樹脂に対して硬化工程を廃止でき生産性を向上させられる可能性があり、リサイクル面でも分離が容易な熱可塑性 CFRP の開発が期待される。CFRP 強度や耐衝撃性に優れた樹脂材料の開発と、樹脂の性状に合わせた成功工法（FW 又は ATP）双方の開発が必要である。

また、多給糸・ブレードイングなどの新しい連続繊維積層製造法の理論探求も必要。

(3) 革新タンク構造

【CFRP 構造】

CFRP 製高圧タンクを構成する炭素繊維の使用量(\propto コスト)を低減するため、タンク内の、炭素繊維の強度余裕分布を極力均等にするよう、従来のFW構造の枠を超えた繊維配置の自由度が高い複合材構造の検討が始まっている。構造に加えて、繊維配置の自由度を上げつつ製造速度(\propto 1/コスト)も向上する検討も同時に進められている。

必然的に発生するCFRPの不連続部の構造設計が重要であり、継続した研究が必要である。従来一体であったCFRP構造体を分割体で構成する概念により、適材適所に異なる素材を使用することも可能となり、マルチロードパス・マルチマテリアルの構想を取り入れることができる。これにより、より安価な材料を使用しコスト低減を進める。

マルチロードパス・マルチマテリアルの究極の形態は車体構造とのインテグラル化である。水素貯蔵容器は認証部品でもあり、製品としての設計自由度などの得失を含めて継続的に検討する必要がある。

【ガスバリア構造・ライナー】

現状のCFRP製高圧タンクは、ガスバリア機能をライナーのみが受け持つ。

強度を受け持つCFRP構造にガスバリアの機能を持たせたり、薄膜ライナーを用いたタイプ5容器の検討が、欧州を中心に既に始まっている。このコンセプトは部品を統合または最小化することができ、コスト低減と質量貯蔵密度の向上に有効である。ライナレスの構想は、ロケット用液体水素タンクで先行しているが充填放出を繰返す乗用・商用用途では耐久性等を慎重に検討する必要がある。

海外に遅れることなく、且つ確実なガスバリアを実現するため、CFRPのガスバリア理論の解明及び薄膜/塗工ライナー用材料・製法の開発に着手する必要がある。

【生産技術】

前述の革新タンク構造にて、炭素繊維の最適配置の構想を述べたが、これに必要な従来のFW工法と異なる工法の検討も始まっている。ドーム部(鏡部)を部分的に補強するためのチョップドテープやUDテープからのプリフォームはその一例である。

しかしながら、圧力容器に限らず複合材料製品の工法開発は、国内に対して海外メーカーおよび研究機関での検討が進んでいる。水素貯蔵容器の工法研究については、海外機関との情報交換を含めて継続的な検討が必要である。

(4) スマートタンク

【ヘルスマニタリング】

現状規格で設計された乗用車用高圧タンクは、製品寿命中にかかるであろうすべてのストレスを付与した後も、ほとんど強度低下していない[1]。

過去、高圧容器の安全率は検査方法の進歩に合わせて軽減されてきた経緯がある。CFRP製容器の高精度・高信頼性のある非破壊検査技術を確立し、高圧タンクの状態や残存寿命を把握できるヘルスマニタリングシステムを構築することで、タンクの極限軽量設計や長期持続使用を

加速化が期待できる。

また、車両の IoT が発展し、車両の水素貯蔵容器の状態を相互監視可能になることを想定すると、過剰な安全率を低減でき、容器寿命を把握しながらのタンクの安全運用が可能となる。

さらに、ヘルスマモニタリングを実施しながらの運用を前提としたときに、現状の安全率設定を再考（引下げ）する必要がある、最適安全率の再定義とそれを旨とした技術体系の構築に向けた研究を通じて、合理的な規制の適正化につなげる。

尚、ヘルスマモニタリングの導入は、センサー等の価格が加算されるため大型の商用車両・船舶からの導入がしやすいと推定される。

同時に、容器の損傷状態を正確に把握することで、合理的な LBB（リークビフォアバースト）設計が可能となり、安全設計のための規定サイクル数を低減することが可能であり、コスト低減と質量貯蔵密度の向上に有効である。

（参考文献）

[1] gtr13 Phase2 前文参照 (<https://unece.org/sites/default/files/2022-09/ECE-TRANS-WP.29-GRSP-2022-16e.docx> P.23)

【スマート材料】

材料自体が自動検知性能や自己修復機能を有する、スマート材料の基礎研究も行われている（成形加工 第 32 巻 第 7 号 2020、p252-253.）。将来的には樹脂カプセルを用いた損傷自己修復型の CFRP 用樹脂やライナーとして、自己修復性や自動検知性をしたスマート材料を適用することで、検査や修復を自動・自律化することが可能となる。ヘルスマモニタリングや修復の自動化による低コスト化や容器データのデジタル化への寄与が期待できる。

（5）環境/LCA/サーキュラーエコノミー

【リサイクル技術】

高圧 CFRP 容器から炭素繊維を長線維として取り出すリサイクル技術は様々な方法が検討されている。しかしながら、完全に初期の連続繊維の状態にリサイクルすることはたいへん難易度が高い。現状を考慮すると、ある程度の有限長（数 m～10m 程度）を想定する必要がある。今後、タンクからタンクへの水平リサイクルを想定した場合には、タンクの構造もそのような有限長を前提とした成形技術の開発が必要である。カーディング技術等を用いた繊維束成形技術の確立とそれらを用いたタンク成形技術の検討も水平リサイクルの観点からは重要である。

また、サーキュラーエコノミーを考慮すると、繊維のみに限らずマトリクス樹脂も循環・再利用を考慮した研究が必要である。

【長寿命化】

長く使うための設計・修理・修復技術（短・中期的には自動・自律ではないものが主で、上記の自動化は将来的には長寿命化と結びつくこととなります）として、従来 FRP や循環素材の長寿命化研究開発も重要であるが、自己修復性樹脂の適用など、さまざまな技術の適用が考えられる。CFRP における疲労損傷は、多くの場合樹脂の損傷に起因するトランスバースクラックと積層材料間の層間剝離の進展特性に依存すると考えられるため、長寿命化のポイントは樹脂

の疲労特性を改善すること、繊維/樹脂間の界面接着特性を改善することが重要である。

(6) 次世代プロセス設計

【DX 技術/デジタルツイン】

水素貯蔵容器の設計・製造において、シミュレーション技術と製造データ・評価データを連携した MI (マテリアルズ・インフォマティクス)、PI (プロセス・インフォマティクス) 技術を構築することで、設計・製造の効率化・高度化や新設計の実現、品質向上の実現を期待する。また、今後の水素貯蔵容器の開発においては、設計・製造のみを対象にするだけでなく、長期使用 (検査・修理含む) やリユース・リサイクルのフェーズまでを考慮した循環型経済を見据えた取り組みが必要である。長期使用やリサイクル (循環配慮設計) においても DX 技術の活用が必須である。

今回のロードマップでは、製造・長期使用・リサイクルを対象とした DX の研究～実証までをアジャイルに進めるイメージを表現したが、水素貯蔵に必要な DX 技術への落とし込みがさらに必要である。水素貯蔵 DX のロードマップについては、次期も継続して議論が必要である。

2.8.2 技術開発課題 (液体水素)

2017 年発行の NEDO 技術ロードマップに 2025～2030 年目標として示されていた「質量貯蔵密度目標 17wt%、及び BOG 目標 0.5～1%/日 開始時間 200h」を 2030 年目標として残置した。

既存事業で開始されている、容器内での液体水素挙動解明の研究開発と、液体水素貯蔵容器用材料開発は今回のロードマップに記載した。これらの研究は今後の燃料容器用液体水素貯蔵技術研究のベースになる。

その他の目標と技術開発項目は次年度に詳細を議論することとする。

2.8.3 技術開発課題 (水素貯蔵材料)

従来の金属系の水素貯蔵材料 (水素吸蔵合金) は、材料単体としては比較的高い体積貯蔵密度を示すことが知られているが、質量貯蔵密度は 10～30g-H₂/kg 程度であり、表 2.4.3-6 で示した 2050 年の仮目標の実現には最新の水素科学に基づくブレークスルーが求められる。そのためには、金属材料に加えて高分子材料や多様なナノ構造 (低次元構造や多孔質構造など) を有する材料を対象に、水素圧力や温度などの外場条件を拡張した材料探索や高精度での材料特性評価、さらにはデータベースに基づくマテリアルズ・プロセスインフォマティクス (MI・PI) などの高度利用が不可欠となる。また、高密度水素化物の合成研究が先行する超伝導分野などとの大胆な分野融合も重要であろう。

これらの視点で、2050 年仮目標の実現に向けた以下のような研究環境整備や技術開発が急務となる。

- 1) 水素圧力を拡張 (~100MPa) した材料探索や高精度での材料特性評価のための共同利用設備の設置、および分野融合や若手育成を目指した研究者ネットワークの拡充
- 2) 自律実験・自動解析も含む大型研究施設と連携した先端計測技術の構築
- 3) 系統的なデータベースの構築とそれに基づく MI・PI への展開

- 4) 研究者ネットワークに基づく確実かつ迅速な材料探索と水素貯蔵技術としての高度化
- 5) 社会実装を目指した充填プロトコルや貯蔵材料・形状自由度の高い容器 (w/熱交換器) の量産技術の確立

2.9 DX 技術

日本の水素・燃料電池技術開発が、SDGs・CN において、日進月歩の領域で世界をリードし、世界に貢献・我が国の産業に貢献していくためには、

- 1) 進化を敏感にとらえた魅力ある目標：ベンチマーク（BMC） 課題共有 戦略議論
- 2) 世界に先駆け目標達成できる開発力：DX 解析力 人材育成 オープンイノベーション・コンソーシアム

が重要である。一方、材料開発などに比べ、DX は目標や取り組みが曖昧になりがちのため、DX をロードマップで取り上げ、早期 DX 活用の推進で、開発力の強化（開発期間の短縮）に結びつける必要がある。

他の技術領域を対象とした DX の国の取組みと上手く連携しつつ、水素・燃料電池で個別に取り扱う DX の要素技術としては、基盤としてのデータベースとデータプラットフォーム、インフォマティクス（MI、PI、MEI）、自動・自律実験、計算技術・モデル化技術、自然言語処理を取り上げ、ロードマップに記載した。

2.9.1 データベースおよびデータプラットフォーム

<データベースについて>

DX を進めるにあたり最も重要なものがデータであり、燃料電池・水素技術開発においても同様である。研究開発の現場で生み出される様々なデータを分析し、アクションを検討し、実行・評価した結果をデータとしてフィードバックすることで、試行錯誤のサイクルを高速化・効率化し研究開発が加速される。高速化・効率化のためには、作成されたデータを限られた範囲での一時的な利用にとどめず、データベースとして蓄積して広範囲で永続的に活用することが、非常に重要になっている。

【NEDO PEFC データベース】

NEDO 事業により開発が進められている触媒、電解質など材料群の解析・計測データについては「PEFC データベース」として登録が進められており、材料の合成・評価の進展とともにデータが拡充される見込みとなっている。さらに、均質で大規模なデータを作成可能な計算物性データ、今後自動化・自律化により加速化される見込みの大型放射光施設による解析データ、自律実験により合成・評価が自動化・加速化される見込みの合成・評価データ、文献から抽出された材料・プロセスに係るデータの蓄積をすすめ、材料開発におけるデータ活用を標準的なものとしていくことが必要である。

【データベース連携技術】

データ収集・蓄積デジタル時代の産学連携の実現に向けては、ステークホルダー（顧客企業、開発協業先、環境価値層創出に向けた協力企業など）とのデータ連携において、産学連携強化の視点でデータを階層的にカテゴライズしたうえで、企業－企業間、企業－大学・研究機関間で共有すべきデータの戦略的抽出と、その活用手法やルール整備等が重要となる。

共有すべきデータかブラックボックス化すべきか、適宜判断が必要であるが、データ共有階層においては、各社の秘匿領域に踏み込まない範囲内で、業界内に利用できる情報を戦略的に抽出する仕組みづくり暗号化技術やプログラムを秘匿したまま計算できるセキュリティ技術の開発も必要となる。

<データプラットフォームについて>

データプラットフォーム構築の究極の目標は、燃料電池・水素技術開発に関連するあらゆるデータを集積し、開発に係る誰もが利用できるようにして、技術開発を行う上でデータの力を最大限に発揮することである。そのため DX を支える中核となるインフラとして位置付けられる。

データプラットフォームは、一般的に、データを格納するストレージ、データを変換・加工する機能の他、収集したデータに意味を与え、セキュリティの確保、データ全体の統制、データ利用のためのインターフェースなどの機能を備えたシステムである。燃料電池・水素技術開発では、これらに加え、データ駆動型開発に向けた分析、機械学習・AI 等の機能を持たせたものとした。より具体的な機能としては、データベース（システム）、データ可視化、データ登録・管理、アクセス制御、機械学習ツール、機械学習モデル・モデル管理、メタデータの統合的管理（オントロジー）などの機能を備えるものである。

材料開発においては、データ駆動型開発を有効に機能させるためには、材料開発者が合成・評価したデータを漏らさず登録・集積しながら、開発者自らが日常的にデータや MI を活用して開発を進めることが必要である。また、部材やセル・スタックの中で機能させるため、材料には様々な物性・特性が求められており、異なる種類のデータを材料種で紐づけるようにするなど、統合的に利用できるようにすることも必要である。多種多様なデータを取り扱う必要がある場合には、データには当然のように欠落がありインフォマティクスの適用が困難となることが往々にしてあるが、適切なメタデータの付与によりデータ間の紐づけを行うことは、インフォマティクスの適用を行う上でも非常に重要である。

データプラットフォームには、ユーザーがこれらを容易に行えるようにすることが求められており、NEDO 事業では「MIX プラットフォーム」として開発が始められている。データ作成・登録数の拡大と MI 解析の高精度化の好循環を生み出すため、継続的に、データ利用時の利便性の向上と MI 解析機能の向上を進める必要がある。また、コンピュータ上で仮想的に構築された開発対象モデル（デジタルツイン）をもとにして、様々な詳細度のシミュレーションだけでなく計測・測定データを活用しながら開発を進めることも必要であり、シミュレーションツール、解析モデル、入出力ファイル、構造モデル可視化ツールなどに対する対応も必要になる。

2.9.2 インフォマティクス

(1) MI (マテリアルズ・インフォマティクス)

燃料電池システムの性能・耐久性向上のためには、セル・スタックや水素タンクを構成する材料の開発が必要である。特に、電極触媒、電解質、水素貯蔵材料などの材料特性を向上させることが重要であり、世界的な開発競争の中で、有望な材料を如何に速く効率的に探索・開発できるかが鍵となっている。このため、マテリアルズ・インフォマティクス（以下、MI）と呼ばれる分野の技術を燃料電池・水素分野の材料開発に適用し、材料の研究開発を劇的に加速することが期待されている。

材料開発は、対象とする材料の性質や材料が機能する際の現象とメカニズムなどの科学的な知

見にもとづくアイデアや、専門家の経験によって蓄積されてきた知見に基づいて、材料を設計し、合成して、分析・評価するというサイクルで開発が進められる。この開発のサイクルは、試行錯誤の繰り返しを伴うものであり、人手で行う過程が特に律速となる。これらの過程を如何に高速化、効率化できるかが鍵となっている。

MI は、実測または理論計算による大量のデータに基づいて機械学習をはじめとする統計学・情報学的な手法により、材料性能の予測と所望の性能を持つ材料探索などを行うものである。大量のデータに基づく方法論であるため、MI を用いた材料開発はデータ駆動型材料開発とも呼ばれる。MI を材料開発に適用する効果については、例えば、精度の高い予測モデルができれば、膨大な組成や形態をとり得る材料のなかから有用な候補を高速かつ合理的に選別することが可能になる。さらに、実際に材料を合成して評価する過程を大幅に削減でき、開発の加速化につながる。

材料開発で想定されている MI の利用目的 ([1,2]参照) について、下表 2.9.2-1 にまとめた。ここでは、特に手段・データ種などに限定せず、材料開発に資する様々な目的を含め整理した。

表 2.9.2-1 材料開発での MI の利用方法

項目	内容
特性・性能予測	<ul style="list-style-type: none"> 物理化学特性の予測 材料性能の予測
材料発見・設計	<ul style="list-style-type: none"> 候補リストからの選択 新規組成・分子構造の生成 既存材料の性能・特性を凌駕
現象の理解	<ul style="list-style-type: none"> 法則の定式化 支配的要因の抽出 分析を容易にする可視化
合成プロセス設計	<ul style="list-style-type: none"> 合成経路探索・逆合成 プロセス条件探索・最適化(※1)
モデリングの高度化	<ul style="list-style-type: none"> 複雑な現象の代理モデル 高精度・低計算コスト
材料のキャラクタリゼーション	<ul style="list-style-type: none"> 分析装置で生成されるデータからの情報抽出(※2)
知見抽出	<ul style="list-style-type: none"> 論文・特許文献からの知見抽出・整理(※3)

※1 対応する技術はプロセス・インフォマティクス (Process Informatics) に含まれる (2.9.2-(2)参照)。

※2 対応する技術は計測インフォマティクス (Measurement informatics) に含まれる (2.9.2-(3)参照)。

※3 自然言語処理 (Natural Language Processing) の技術が用いられる (2.9.4 参照)。

材料開発への MI 適用を困難にしている要因と考えられている課題 ([1,2,3]参照) について、下表 2.9.2-2 にまとめた。

表 2.9.2-2 材料開発への MI 適用の課題

項目	内容
多様なデータへの対応	<ul style="list-style-type: none"> 様々な材料種・異なるラボからのデータ 様々な物性・特性・分析手法などマルチモーダル 様々なフォーマット
小規模データへの対応	<ul style="list-style-type: none"> 実験データが少ない(<100) 広大な探索空間のなかのスパースデータ
サンプルバイアスの存在	<ul style="list-style-type: none"> 論文化に向かない失敗データが欠如(傾向の学習が難)
予測タスクの特徴	<ul style="list-style-type: none"> 飛びぬけた性能や新奇材料など「規格外」に強い関心 予測モデルの不確実性
データ統合指針策定	<ul style="list-style-type: none"> 網羅的、十分な情報量があり、柔軟性があるメタデータの定義

データ共有/知財保護	<ul style="list-style-type: none"> 共有による相乗効果の出現 知財保護のためクローズすることによるサイロ化
エコシステム構築	<ul style="list-style-type: none"> 多数の関係者が有用性を受け入れ、継続的にデータ蓄積・共有が行われる体制の構築
長期維持・管理コスト	<ul style="list-style-type: none"> DB・モデルバージョン管理・アクセス管理・データマネジメントなどインフラへの多大な投資

NEDO 事業では、MI の主要な目的（表 2.9.2-1 参照）である、特性・性能予測、材料発見・設計、現象の理解の目的で、取り組みが行われている。MI はデータの規模が大きいほどより効果があると期待されているが、各々のラボで実際に合成して評価できる材料種数は限られる。今後自律実験により個々のラボで合成・評価する材料自体を増やしてデータの拡充をはかることで、予測の高精度化を進めていくことが必要となっている。

自律実験などにより合成・評価する材料を増やすことは必要であるが、一方で、潜在的な材料の候補の範囲は莫大であり、その中を探索するには計算や情報学の助けを必要とする。例えば、有機低分子について、経口医薬品に対する一般的な基準を満たすに分子（いわゆるケミカルスペース）に絞ったとしても 10^{60} 種程度あると見積もられているが、データベースに登録されている既知の低分子はわずか 10^9 種程度である[4]。このように材料の探索空間は広く、コンピュータ上での仮想的な材料の生成と計算によるスクリーニングを活用していく必要がある。

個別のラボで取得されたデータなどデータソースが異なるとデータの品質や値の傾向が異なり、またデータ取得に対する着眼点（データ項目）が異なること場合もある。これらの多様なデータを統合的に利用するためには、標準化や欠測値の補完が必要になる。これを行う上では、幅広い範囲で均質なデータが利用できることが望ましく、計算データの作成と活用が期待される。

機械学習に対しては、データに適合した推論モデルを構築し、そのモデルを用いて推論に影響をあたえる要因分析を行うという利用方法も期待されている。触媒層での触媒機能発現や劣化などのような複雑な現象・対象に対して適用し、学理・現象の解明に貢献することで新たな探索や設計指針が得られれば、技術開発全体の加速化につながる。

以上の技術開発により集積・統合化されたデータを有効に活用して、有望材料の効率的な探索と発見を加速化していくことが必要である。

（参考文献）

- [1] Himanen, Lauri, et al. "Data - driven materials science: status, challenges, and perspectives." *Advanced Science* 6.21 (2019): 1900808.
- [2] Morgan, Dane, and Ryan Jacobs. "Opportunities and Challenges for Machine Learning in Materials Science." *Annual Review of Materials Research* 50.1 (2020).
- [3] Citrine Informatics Inc. "Challenges in Machine Learning for Materials and Chemicals - And how to overcome them." (2020)
- [4] Reymond, Jean-Louis. "The chemical space project." *Accounts of Chemical Research* 48.3 (2015): 722-730.

（2）PI（プロセス・インフォマティクス）

「プロセス・インフォマティクス」については、現時点で明確な定義はないが、「材料の形状や化学的な質が時間軸で変化するプロセス設計・制御のためのインフォマティクス技術。サイエン

ス（物理・化学）に基づき、多工程にわたる製造プロセスの基本設計や、そのスケールアップに活用できる計算科学と実験科学の融合技術」と定義する。

図 2.9.2-1 に、燃料電池の製造工程及び図 2.9.2-2 で具体的実現手段の候補として挙げた四つの技術開発項目との関係とその方向性を示した。燃料電池の製造各工程で生じる現象のメカニズムの統一的理解を目指すためには、各技術開発項目ともに、全工程をカバーするような開発に取り組む必要があると考えられる。

高度観察技術の開発に関しては、SPring-8 等の大型量子ビーム施設の活用が望まれる。

また、統一的过程シミュレータの開発に関しては、工程と連携させながら計算する、大規模で複雑なモデルを扱うことが想定されるため、大規模な計算リソースを持つ HPC（High Performance Computing）システムの活用が望まれる。

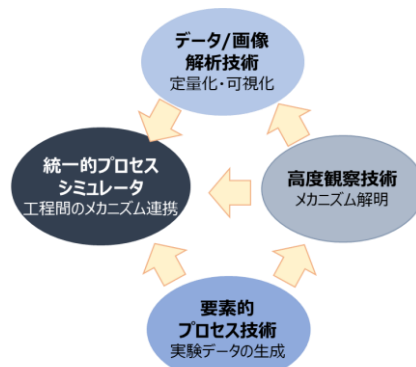


図 2.9.2-1 プロセス・インフォマティクスの連携イメージ

出典: NEDO TSC Foresight vol. 107 「電子部品用ファインセラミックス分野の技術戦略策定に向けて」(2022)

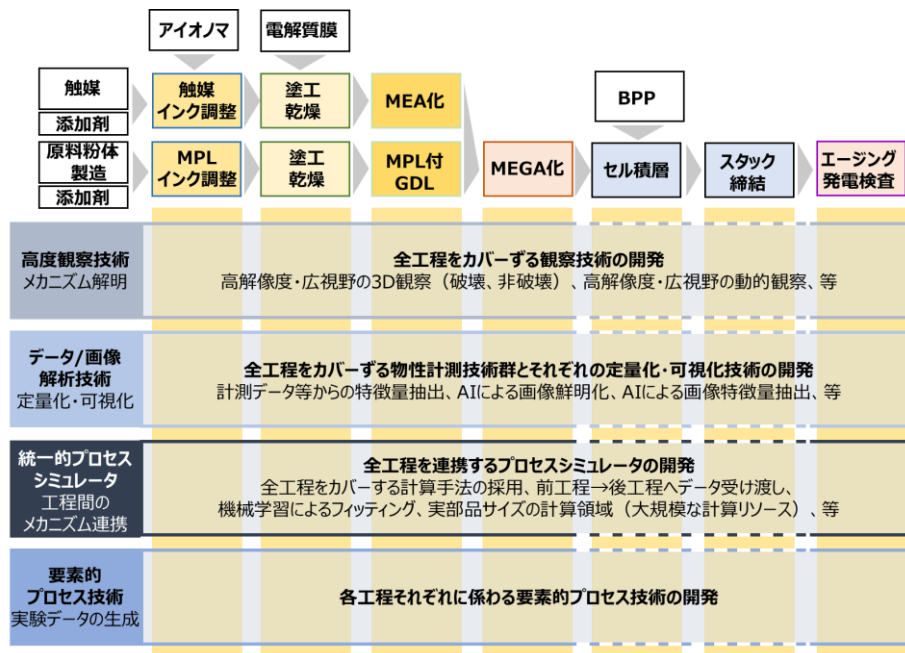


図 2.9.2-2 技術開発項目とその方向性

出典: NEDO TSC Foresight vol. 107 「電子部品用ファインセラミックス分野の技術戦略策定に向けて」(2022)を基に作成

(3) MEI (計測インフォマティクス)

計測インフォマティクス (MEasurement Informatics) は、情報学・統計学的手法により計測と解析を効率化・高速化・高度化する技術の総称である。ハードウェアの性能向上による計測の高速化や、ロボティクスによる測定自動化に加えて、機械学習等の情報学的データ駆動型アプローチにより、計測および解析で行われる①計測 (計測条件パラメータの最適化を含む)、②解析 (スペクトル解析や画像解析など) ③データ整理・判断・蓄積の各プロセスを、高速化、自動・自律化することで、MI や PI などのデータ解析に必要な大量データの収集を効率的に行うことを目指している。また、微量の材料や原子単位のきわめて希薄な活性点構造や電解質膜におけるプロトン輸送に関わる構造など、通常の計測では感度が低く観測が困難な計測対象や、実機のオペランド計測のように筐体等の影響で十分なシグナルが得られない場合でも観測を可能にする手法として期待される。

計測の高速化は、機械学習を用いた計測条件の最適化 (プローブ強度、検出器感度、測定部位の選択など) [1]、ノイズ除去による S/N 改善をベースとした計測時間の短縮[2]、ガウス過程回帰等による合理的な測定点削減[3]などにより実現される。

解析の高速化は、取得したスペクトルや画像データに対して、ディープニューラルネットワークを用いたノイズ除去やスペクトル分離、画像認識、クラスタリングによるピーク分離・画像解析[4]、スパースモデリングによるピーク分離[5]、リートベルト解析など多変量の最適化[6]などが提案され、機械学習を用いた高速解析が可能になりつつある。

取得した大量のスペクトル・画像等の解析データを整理して計測結果の良否を判断したり、データベース化したりするプロセスも多く時間を消費するが、取得データの特徴量抽出とクラスタリング・次元削減などの手法により、大幅な効率化が期待される。また、触媒層の構造や形成過程のような複数の要因を含むデータのマルチモーダル解析にも、機械学習の手法が活用されつつあり、今度さらなる高度化が期待される。

MEI の手法は、計測データの分解能の向上や、計測条件パラメータの設定と最適化、解析手法の選択と解析パラメータの設定と解析結果の判断、複数の解析結果の統合的な解釈など高度な専門知識や熟練を要する部分を機械学習により属人性を排除して高速化することが可能になると期待される。先端分析機器や、多様な構造解析手法・イメージング手法によりマルチスケールの構造解析やオペランド計測が可能な先端大型放射光施設 SPring-8、3GeV放射光施設 NanoTerasu、大強度陽子加速器施設 J-PARC などにおいて、新たに開発される材料や材料、触媒層形成プロセスの解析に適用することで高品質で大量のデータを取得することで、MI や PI による材料・プロセス開発を加速したり、自動・自律実験の要素技術として活用されると期待される。

(参考文献)

- [1] Ueno, T., Ishibashi, H., Hino, H. et al. npj Comput Mater 7, 139 (2021). <https://doi.org/10.1038/s41524-021-00606-5>
- [2] Saito, K., Yano, M., Hino, H. et al. Sci Rep 9, 1526 (2019). <https://doi.org/10.1038/s41598-018-37345-5>
- [3] Ueno, T., Hino, H., Hashimoto, A. et al. npj Comput Mater 4, 4 (2018). <https://doi.org/10.1038/s41524-017-0057-4>
- [4] Baliyan, A., Imai, H. Sci Rep 9, 18241 (2019). <https://doi.org/10.1038/s41598-019-54770-2>

[5] Ichiro Akai, Kazunori Iwamitsu, Yasuhiko Igarashi, Masato Okada, Hiroyuki Setoyama, Toshihiro Okajima and Yasuharu Hirai, *Journal of the Physical Society of Japan*, 87(7), 074003 (2018)

[6] Ozaki, Y., Suzuki, Y., Hawai, T. et al. *npj Comput Mater* 6, 75 (2020). <https://doi.org/10.1038/s41524-020-0330-9>

2.9.3 自動・自律実験

昨今の少子高齢化での研究者の不足が危惧され、コロナ禍における現場での研究開発活動が制限される中で、短時間で最大の研究開発の成果を出すことが求められている。

研究開発においてロボットによる自動化、AI・機械学習で材料の最適化を図る自律化を測る事で、短時間で最大の研究開発の成果を出す。

これまで諸外国で、バイオ・創薬の領域で自動・自律実験が推進されてきている。例えば、英リバプール大では、ロボットを用いて、8日間で688回の実験を実施し、9億8100万を超える候補を対象として、自律実験的に光触媒合成を行う事で触媒活性を6倍以上高めた結果も報告されている[1]。

自動・自律実験ではAIは俯瞰的に物事を見て機械学習を行い、前の実験結果から次の条件を提案する。人間では過去の経験、勘に制約を受けて行動する場合があるが、自動・自律実験では予想外の提案を行う事がある。このように、これまで探索出来ていなかった領域の材料の探索を効率的に行える物が自動・自律実験である。また、自動化を行うことで、人間が実験を行うことで、実験結果に、個人の実験スキルの影響を受けていたことに対し、均質なデータを揃える事が可能となり、MIでの解析により精度の高いデータを提供出来ることになる。

燃料電池を実用化し、広く普及させるためには、2040年の材料目標を達成させる必要がある。この2040年目標は諸外国と比べても高い目標であり、達成には材料の飛躍的な向上が求められる。材料探索では多くの素材の組み合わせ、新たな材料の創出が求められるが、これには多くの工数と時間を要することが予想される。自動・自律実験を材料探索に活用する事でこの探索を効率的に、短期間で行う事が可能となる。現在、セパレータ表面処理、触媒探索に自動・自律実験が適用されつつあるが、電解質膜、ガス拡散層、アイオノマ、ラジカルクエンチャ等のMEA材料、シール材、水素貯蔵材、プロセス等にも適用の検討を推進していく事が必要と考えられる。

(参考文献)

[1] Burger, Benjamin, et al. "A mobile robotic chemist." *Nature* 583.7815 (2020): 237-241.

2.9.4 計算技術・モデル化技術

物理的な実体を計算機上で仮想的に構築・再現する技術は、DXを進めるにあたり必要不可欠な技術である。燃料電池・水素に係る技術開発を加速化するためのDX技術として、計算科学によるシミュレーション、機械学習・AIなどによる情報学的手法をはじめ、量子計算技術を取り上げた。

シミュレーションは、数式で表される物理・化学的な法則に基づき対象物をモデル化し、材料・分子の物性・熱力学的性質や、構造物の機械的特性、気体・液体など流体の流れ場、伝熱現象、電磁気学的な現象などを把握するための強力なツールであり、産業への応用も多くなされている。

一定の精度・予測能力が担保されたシミュレーションを用い、実験ではコスト・資源制約により実現できないような大規模・広範囲な評価を代替することが必要である。例えば、触媒材料のバルクとしての熱力学的安定性の評価を第一原理計算により計算することが考えられる。

機械学習・AIなどの情報学的手法は、データに基づいて対象物の特性・特徴を表現するモデルを構築することが可能な技術である。十分なデータがあることが前提となるが、物理・化学法則で表すことが難しい複雑な現象・未解明の現象や、要素・要因が分解できないような対象に対しても、モデル化やシミュレーションを行うことができる。

原理的解明や要素分解に基づくモデル化・技術開発が困難であるような対象について、モデルを用いた予測・シミュレーションや原理・要因・相関関係の探索という活用の方向性が期待される。例としては、異なる時間・空間スケール階層の物理現象間の橋渡しや、装置全体のモデル（デジタルツイン）の構築が考えられる。

また一般的に機械学習・AIによるモデルは、高精度な計算科学シミュレーションよりはかなり高速にシミュレーションを行うことが可能であるため、より高速に多くのケースについてシミュレーションを行うことも期待できる。例としては、第一原理計算に基づく様々な材料状態（表面、粒子）のエネルギーを計算して比較することが考えられる。

量子計算（量子コンピューティング）は、量子力学の原理を計算に利用した計算技術であり、実用化への期待が高まっている。通常の計算機（量子計算機に対して古典計算機とよばれる）では、0、1の二値として表されるビットを計算に用いているが、量子計算では0、1の重ね合わせ状態をとる量子ビットにより計算を行う。

量子計算機にはゲート型と量子アニーラがある。ゲート型では量子アルゴリズムに基づいて量子ビットに対する演算を行うものであり、量子アニーラは指定する条件下でのイジングモデルの解として量子ビットの「最小エネルギー」状態を導出するものである。さらに量子計算機ではないが、量子アニーラと類似の処理によりイジングモデルの解を求める専用の古典計算機が開発されており、量子インスパイアードと呼ばれている。量子アニーラと量子インスパイアードをあわせてここではアニーラとする。

アニーラは、組合せ最適化問題を解くことに向いており、組合せ最適化が必要となる諸問題に適用できる可能性がある。問題のサイズの観点から実問題に適用できるような計算機の実機も利用可能になってきているが、適用にあたってはイジングモデルとして問題を定式化し、組合せの評価を単純な表式（イジングハミルトニアン）で書き下すことが必要になる。酸性条件での酸素発生反応の触媒の探索に適用された研究事例[1]もあり、MIへの適用が期待される。

量子ゲート型は、汎用性が高い量子計算機であり、量子アルゴリズムにより様々な計算処理に対処できる可能性がある。現状実現されているのは誤り耐性機能がない計算機（NISQ: Noisy Intermediate-Scale Quantum device）であり、ノイズを含んだ計算結果の有効な活用方法について研究がおこなわれている。一方で誤り耐性を持った計算機（FTQC: Fault Tolerant Quantum Computer）は、実現には10年以上の時間を要するとみられているが、一度実現すると計算量・計算速度へのインパクトが極めて大きい。材料の量子化学計算において励起状態の精密なエネルギーを計算することで触媒反応などの詳細な検討が可能になるなど、計算科学に対する適用が期待される。

(参考文献)

[1] Choubisa, Hitarth, et al. "Accelerated chemical space search using a quantum-inspired cluster expansion approach." Matter (2022).

2.9.5 自然言語処理 (NLP)

本章の冒頭に記したように、BMCに基づく開発戦略の構築は重要度を増しており、自然言語処理の活用により、目まぐるしい程の技術の激しい動きや環境の変化に対しタイムリーに正しいBMCを行え、究極では日本の技術開発の戦略を立案するシステムを構築する。また、図 2.6.6-2 および図 2.6.6-3 に記載されているように、毎年膨大な数の論文・特許が公表され、その数はますます増加傾向にある。これらの技術文献を調査し研究開発者をサポートする上でも NLP 技術が必要である。

以下のタイムラインは、現状の NLP 技術では、困難な日程であるが、予想を遥かに超える NLP 技術の進化を考慮すると、容易な日程に変わる可能性もある。いずれにしろ開発戦略構築・技術開発支援への積極的活用は非常に重要であり、燃料電池としての教師データの蓄積を図る必要がある。

表 2.9.5-1 NLP 技術適用のタイムライン

	22	23	24	25	26	27	28	29	30
BMC システム									
分類・要約	—★								
新規性		—★							
重要度			—★						
他技術域					—★				
課題共有									
データベース化		—★							
戦略立案									
BMC 情報纏め			—★						
未来予測				—★					
立案					—★				
文献調査									
固有表現抽出			—★						