

NEDO燃料電池・水素事業 評価解析プラットフォーム

FC-Cubic

雨宮 一樹

NIMS

袖山 慶太郎

京都大学

河瀬 元明

日産アーク

今井 英人

NEDO水素・燃料電池技術開発

新規国家事業の始動



水素・燃料電池戦略技術開発戦略等の政策に基づき、各種課題共有フォーラムで顕在化した産業界の共通課題を『産学官の連携体制』で、『徹底的に解決する』ために、2020年度に新規の大型国家事業を開始

燃料電池等利用の飛躍的拡大に向けた共通課題解決型産学官連携研究開発事業

- ◆ 事業期間：2020年度～2024年度(5年間)、事業規模：50億円程度（2020年度）
- ◆ NEDO負担率：委託事業 [NEDO100%負担] 助成事業 [NEDO50%以内負担]
- ◆ 研究開発課題：

研究開発項目Ⅰ「共通課題解決型基盤技術開発」【委託】

- ・2030年以降のFCVや業務・産業用燃料電池への実装を目指した技術の開発。

研究開発項目Ⅱ「水素利用等高度化先端技術開発」【委託】

- ・2030年以降の更なる燃料電池システムの低コスト、高性能、高耐久に資する水素貯蔵関連技術やその他多様な水素関連技術の高度化に資する技術の開発
- ・研究開発項目Ⅰの性能やコスト目標を凌駕する燃料電池の実現に資する革新的な要素技術

研究開発項目Ⅲ「燃料電池の多用途活用実現技術開発」【助成】

- ・2030年までの燃料電池ユニット等の多用途展開を目指して、エネルギーマネジメント要素も含めた実証事業等
- ・燃料電池システムのコスト低減を実現するために革新的な生産技術

- 今年度、新たに5年間の事業がスタート
- 2030年以降の産業製品実装を目指す
- 実証事業や、更に将来に向けた革新的要素技術開発も実施

NEDO技術開発ロードマップ

内閣府

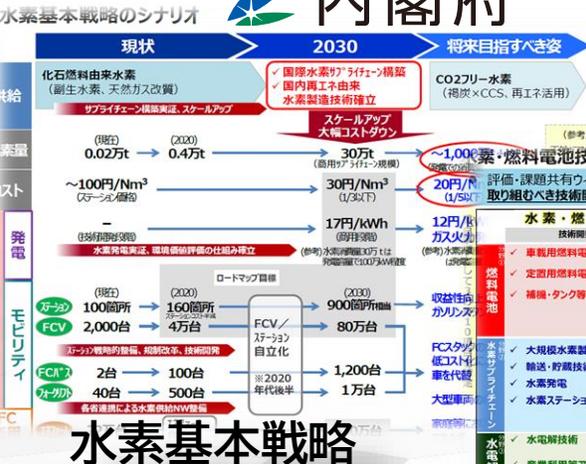
◆ NEDOロードマップ/移動体用(2017.12更新)から一部抜粋



経済産業省

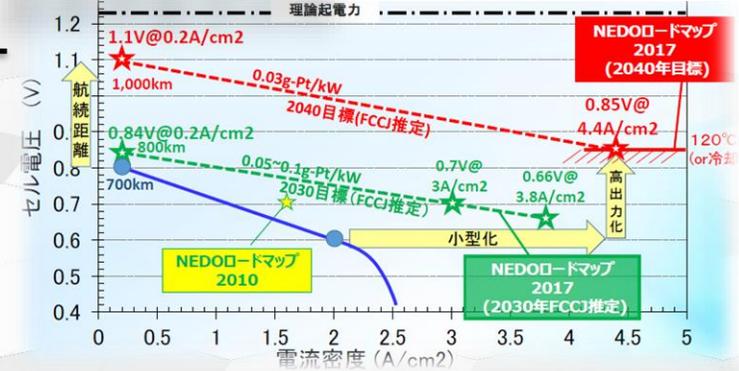
Ministry of Economy, Trade and Industry

	現在	2020年頃	2025年頃	2030年頃	2040年頃
普及目標	【普及台数】 1,600台強	4万台程度	20万台程度	80万台程度	300~600万台程度
達成性能レベル ²⁾					
航続距離 ³⁾	650km	燃料電池車の商品価値として航続距離の向上を継続的に追求		800km	>1000km
スタック性能					
最大出力密度	3.0kW/L	4.0kW/L	5.0kW/L	6.0kW/L	9.0kW/L
最大負荷点電圧 ^{1)ab)}	0.6V				0.85V
耐久性 ⁴⁾	乗用車無交換 (15年)	乗用車無交換 (15年以上)	乗用車無交換(15年以上) /商用車無交換(15年)	乗用車・商用車無交換 (15年以上)	
システム仕様					
起動条件	起動最低温度-30℃(外気)	起動最低温度-30℃(外気)	起動温度の拡大、出力密度向上、作動最高温度向上、冷却性能向上、燃費向上等による車両ハワートレインとしての汎用化		起動最低温度-40℃ 作動最高温度120℃ エア系送給による劣化 または常圧運転に 対応した構造 水素St=1.0付近 7.5wt%以上かつ7 容器形状自由度
スタックシステム	作動最高温度90℃ 作動圧力1.2atm、水素St1.1 ⁵⁾	作動最高温度~100℃、30%RH 作動圧力<1.2atm、水素St<1.1			
水素貯蔵システム (貯蔵量5kg相当の場合)	5.7wt% かつ 125L 円筒形容器	6wt% かつ 100L ⁶⁾ 円筒形容器			
コスト ⁷⁾			同車格のHV車同等価格競争力を 有する車両価格の実現		大量普及に 最終コスト目標
FCシステム (内、スタック)		<0.8万円/kW	<0.5万円/kW	<0.4万円/kW	0.2万円/kW
水素貯蔵システム (貯蔵量5kg相当の場合)		<0.5万円/kW	<0.3万円/kW	<0.2万円/kW	0.1万円/kW
達成すべき技術開発課題 ⁸⁾ (スタックシステム)	実用化に向けた課題 までに達成すべき課題	【2020年頃の実用化に向けた課題】 (2025年頃までに達成すべき課題)	【2040年頃の本格普及に向けた課題】 (2030~2035年頃までに達成すべき課題)		大量普及に向けた更
MEA	耐久MEAの開発(50万km見通し) Roll量産技術の開発	・大型車両用超耐久MEAの開発(100万km見通し) ・CO ₂ 大量生産技術の確立 ・低温(-40℃)起動技術開発	・更なる高性能・高耐久化、低コスト化		
	高出力化 (~100℃(<30%RH))作動MEA開発 質移動(ガス・水分・プロトン等)高度化技術開発	・高金量使用量大幅低減(0.05~0.1g/kW)			



水素・燃料電池技術開発戦略

産業界要求目標

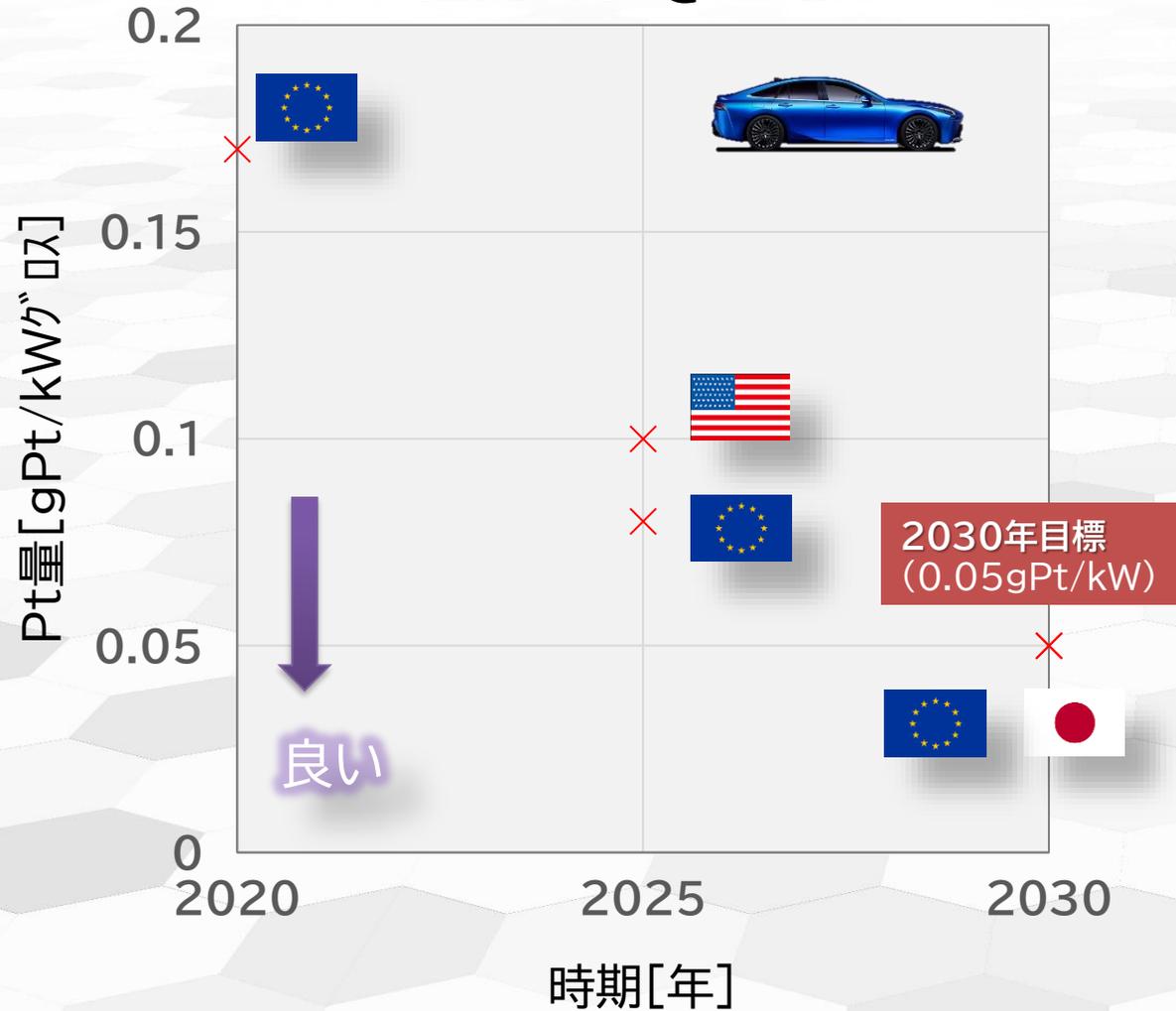


NEDO 国立研究開発法人
新エネルギー・産業技術総合開発機構

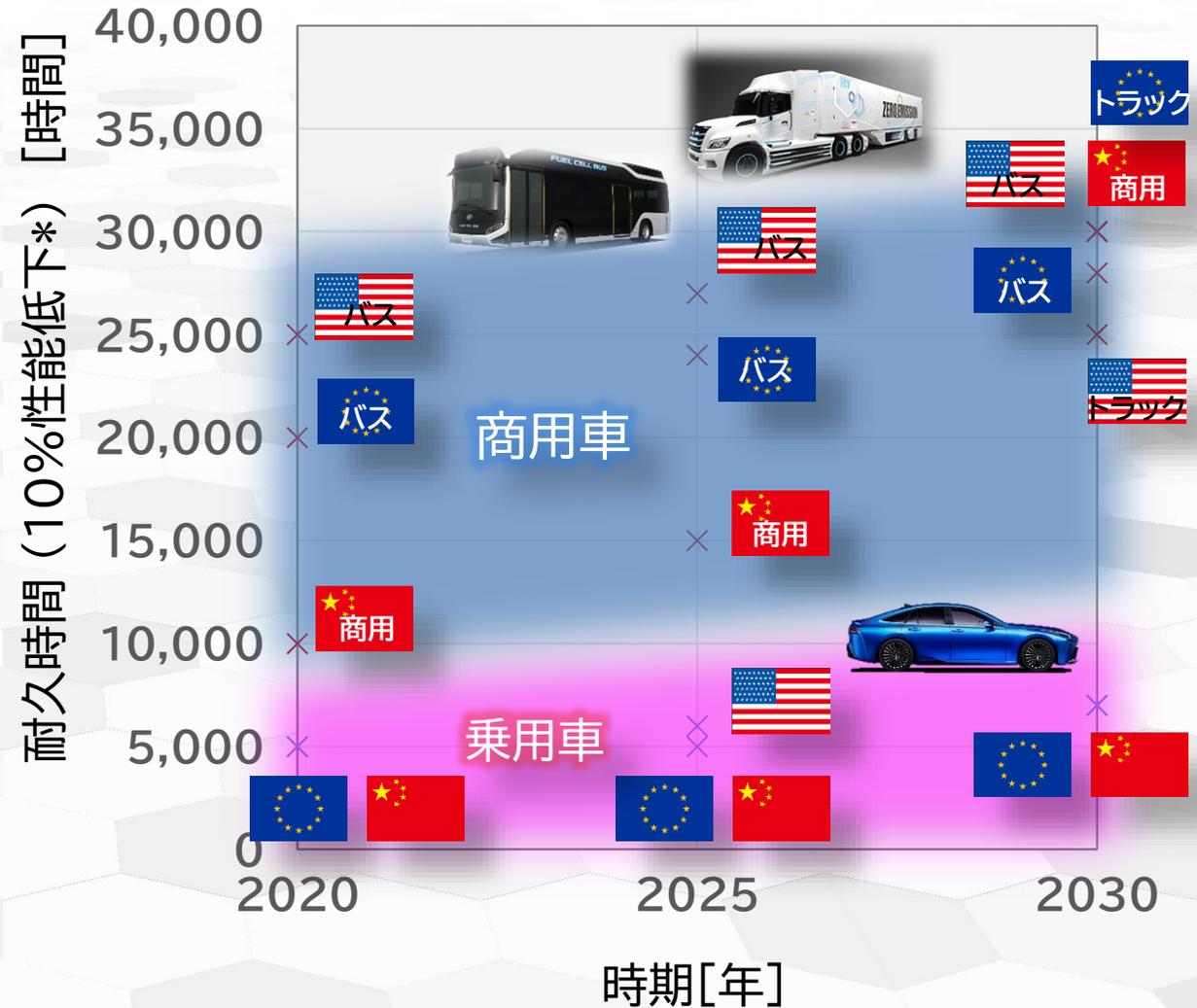


他国と目標値比較

性能目標@乗用車



耐久目標 (乗用車・商用車)

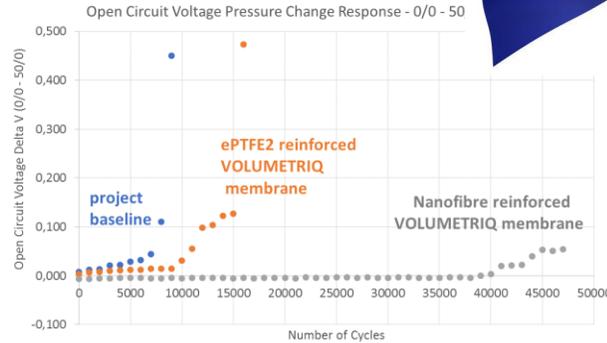
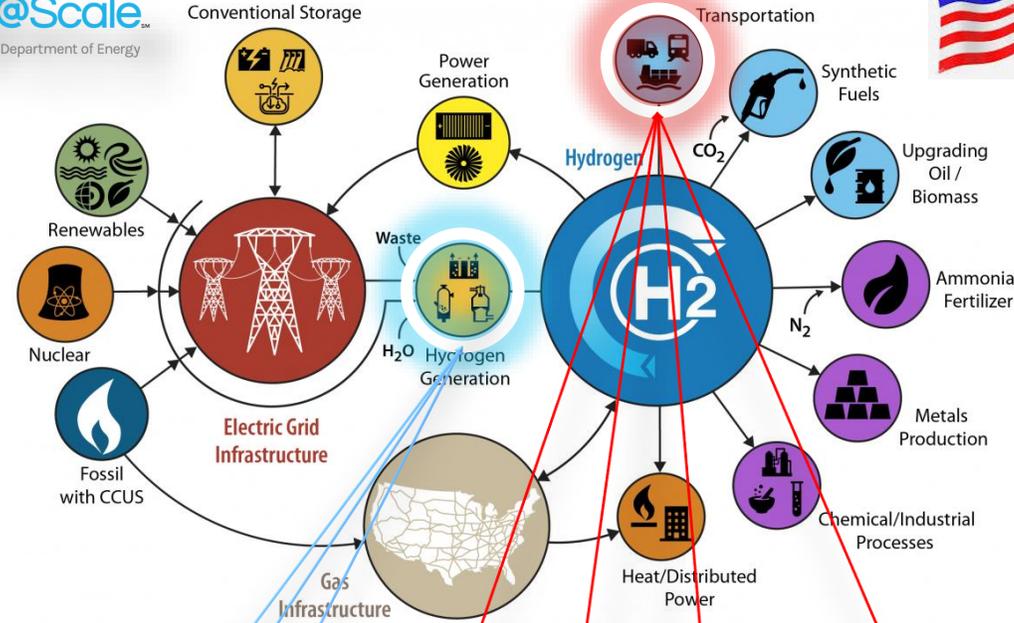
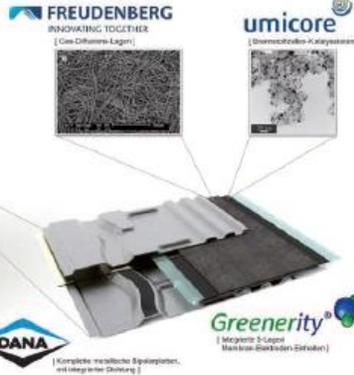


※日本は定量的な耐久目標未設定

他国は国・地域として産官学で加速



スタック量産



スタック量産



水電解槽

H₂NEW

水電解材料



商用車

M²FCT

電極触媒



ベースコンソーシアム



水素貯蔵材

高耐久材料

FC評価解析

【10/8】商用トラック(M2FCT)と水電解槽(H2NEW)のコンソーシアム追加

狙い・目的

【ニーズ】

- 1. 性能・耐久を良くしたい：材料の革新
- 2. 開発をリーンにしたい：予測による効率アップ

材料の革新

【Data-driven/経験的】
データ駆動材料設計

【Model-driven/理論的】
モデル駆動材料設計

MI: マテリアルズ・
インフォマティクス

予測

マルチスケール
現象シミュレーター

評価解析スキーム

専用DB

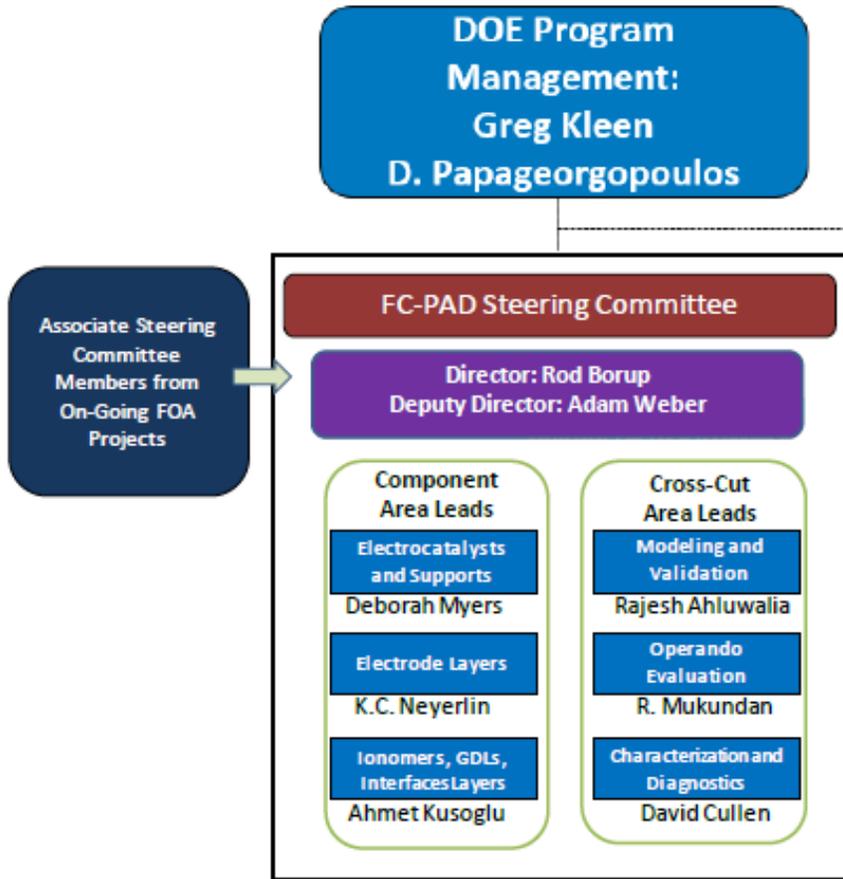
現象解析高度化

現象モデリング

FC-PAD@DOE

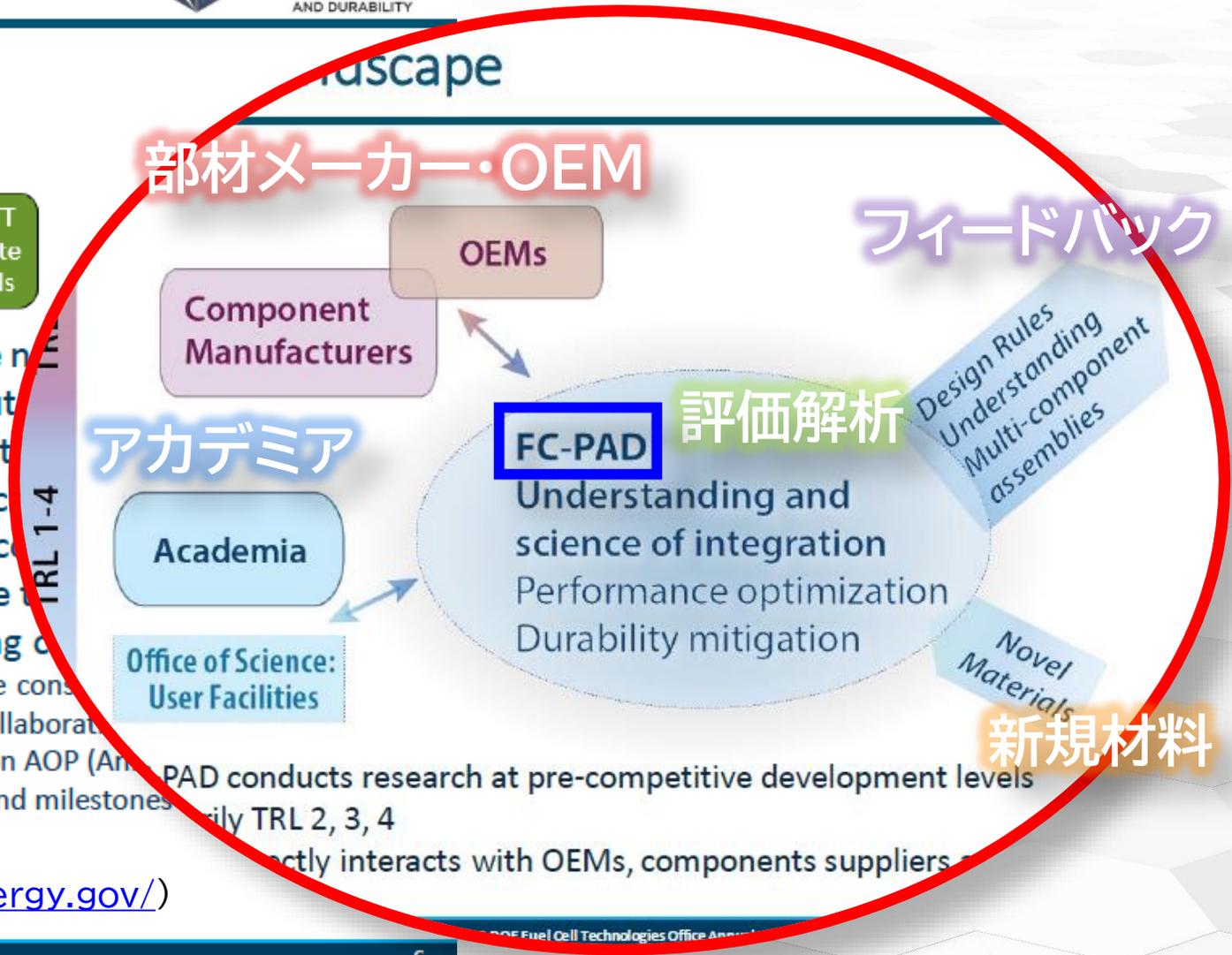


FC-PAD Organization



U.S. Drive/FCTT plus appropriate advisory panels

- Couple n...
- with fut...
- innovat...
- research...
- Other c...
- outside...
- Steering c...
- TRL 1-4



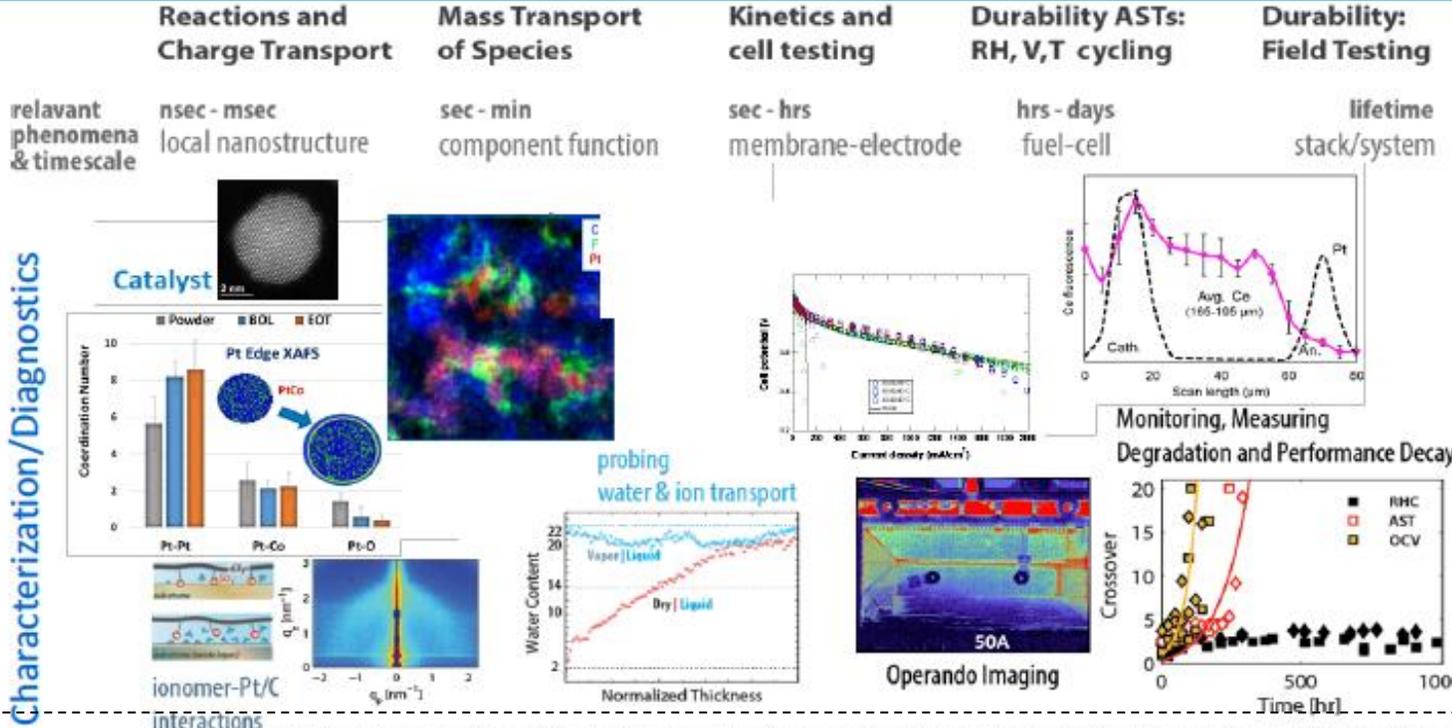
出典: 米DOE (<https://www.hydrogen.energy.gov/>)

FC-PAD/ 解析と予測の連動



Approach

FC-PAD: Exploration of Critical Phenomena



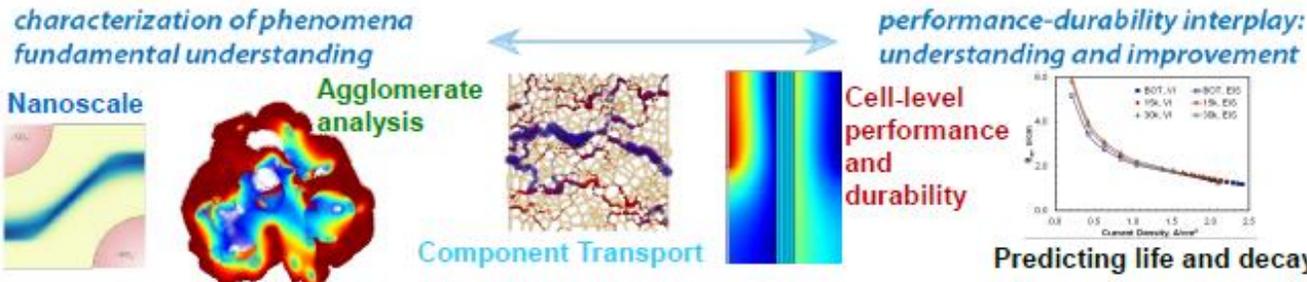
現象解析の高度化
(現象見える化)

現象体系化・予測
(シミュレーション)

分析・現象解析

モデリング

Modeling



出典: 米DOE (<https://www.hydrogen.energy.gov/>)



評価解析プラットフォーム



実証・産業界

新規材料

材料研究グループ



【目的と成果物】

- A) 材料改良方針
材料評価・DB化
- B) 現象の可視化
高度化オペランド
解析
- C) 現象の予測
性能・寿命予測
モデリング



NEDO事業受託大学・研究機関で構成

評価解析プラットフォーム

METI水素・燃料電池戦略 / NEDO事業

- D) 革新材料創生
経験・理論的設計

評価解析PF構成21機関

マネジメントGr



電気化学的 特性測定Gr



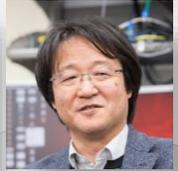
シミュレーションGr



マテリアルズ・ インフォマティクスGr



材料分析/解析Gr



ワークパッケージ (WP)

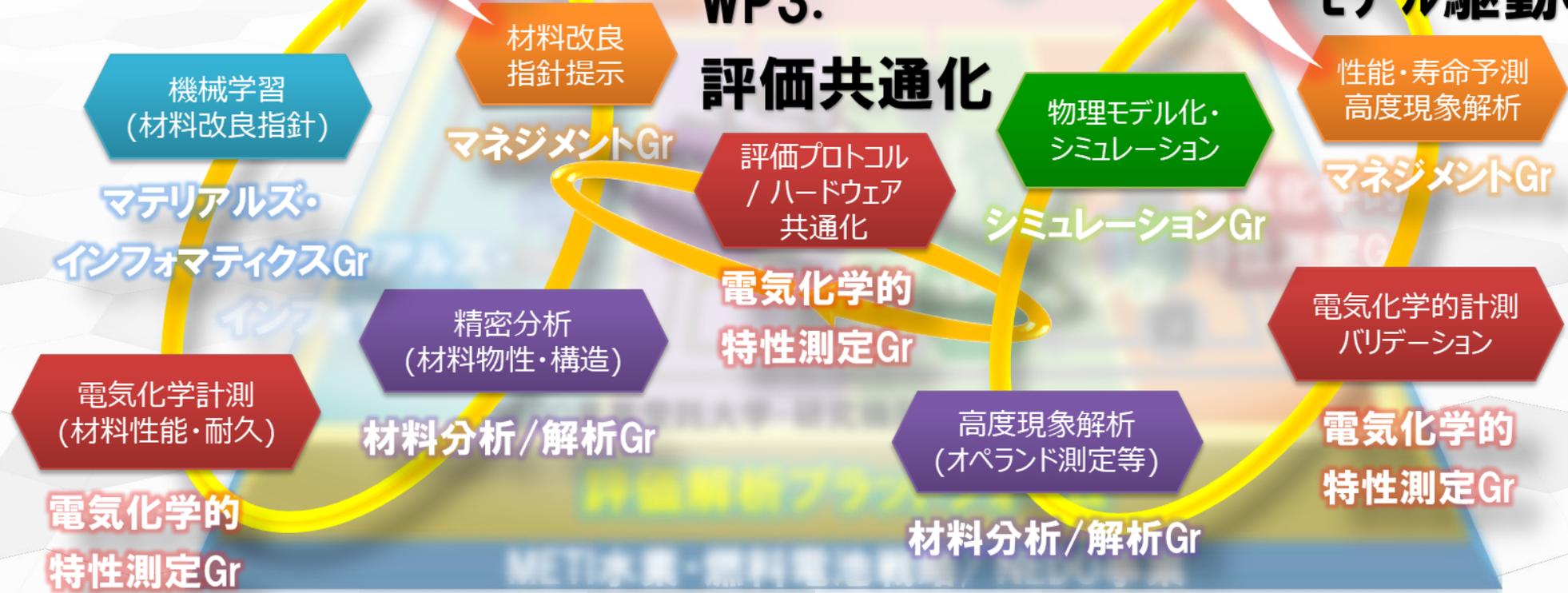
- A) 材料改良方針
- D) 革新材料創生

- B) 現象の可視化
- C) 現象の予測
- D) 革新材料創生

WP1:
データ駆動材料設計

WP3:
評価共通化

WP2:
モデル駆動材料設計



WP1: データ駆動材料設計

- A) 材料改良方針
- D) 革新材料創生



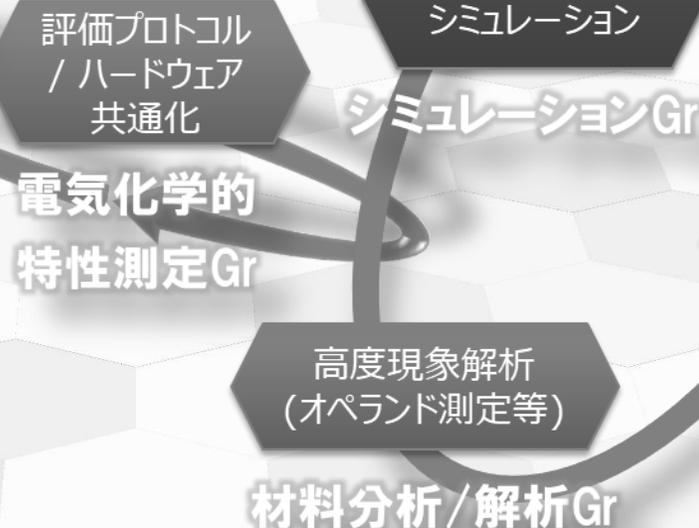
NIMS 袖山

- B) 現象の可視化
- C) 現象の予測
- D) 革新材料創生

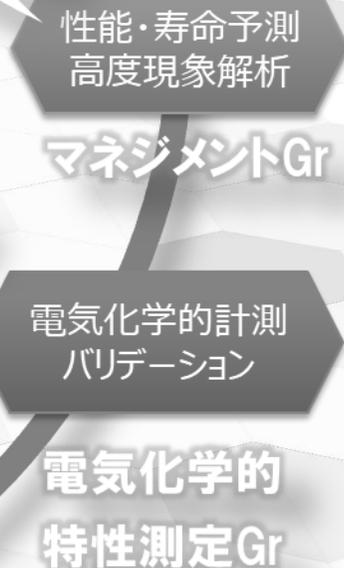
WP1: データ駆動材料設計



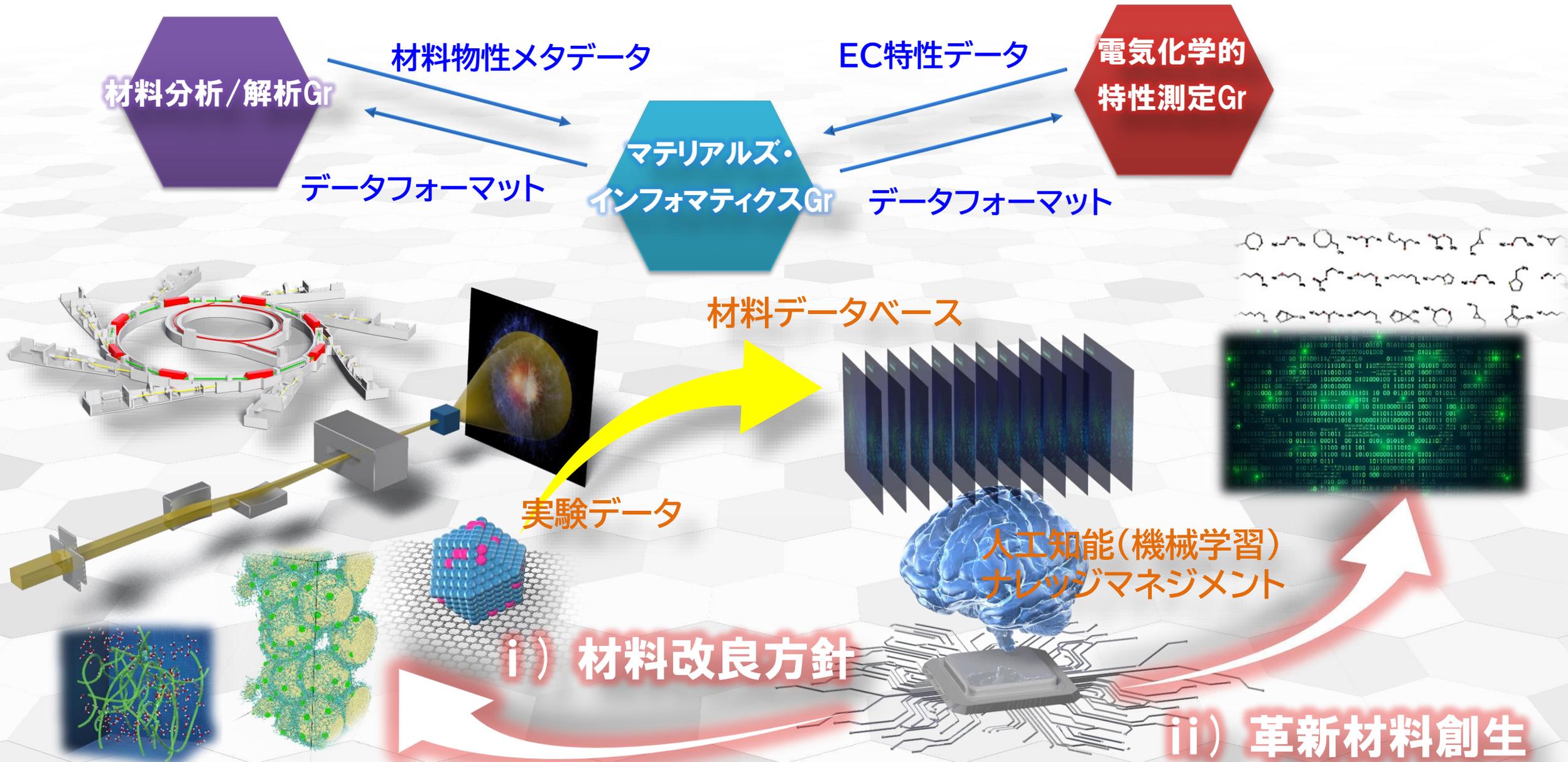
WP3: 評価共通化



WP2: モデル駆動材料設計

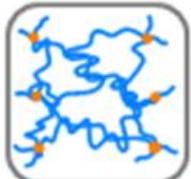


WP1: データ駆動材料設計

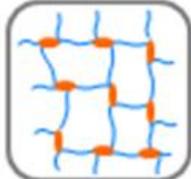


- アクティブラーニングによる
実験条件探索
- 高速、高効率
- 少数の実験値で実施可能

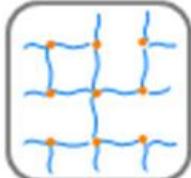
Ex.) 高分子接着剤の接着特性を
向上させる実験条件を探索



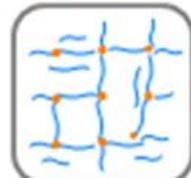
Epoxy resin MVW



Curing agent MVW



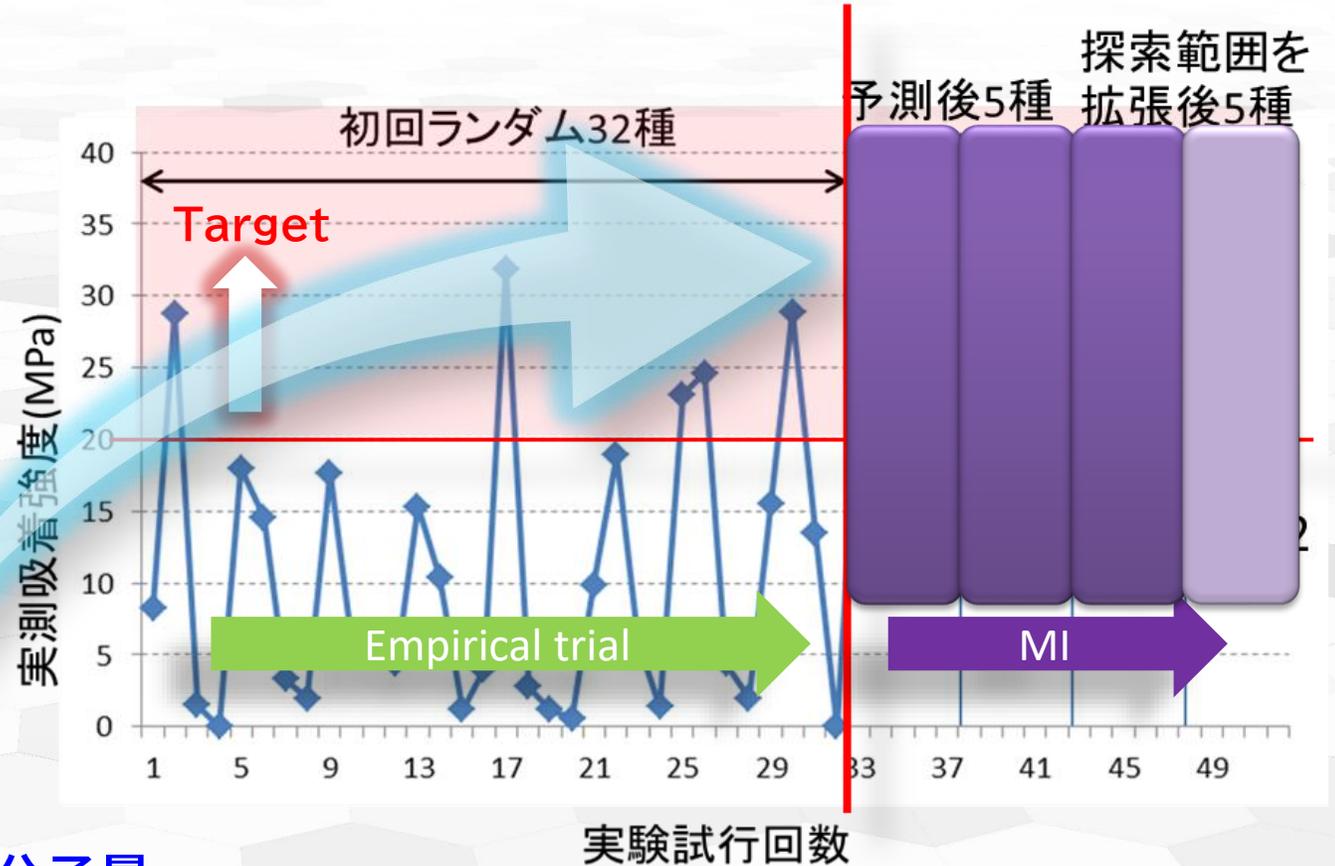
Amine to epoxide



Curing temp.

Epoxy network structure parameter

- 4つの実験条件;
1. エポキシ樹脂の分子量
 2. 硬化剤の分子量
 3. 1と2の混合割合
 4. 硬化温度

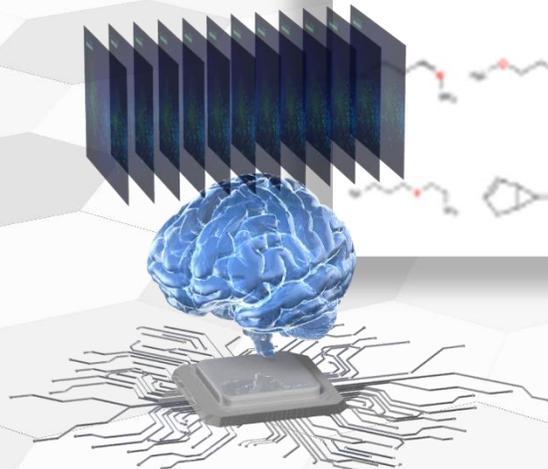


高い接着強度を発現する実験条件を
高速に発見!

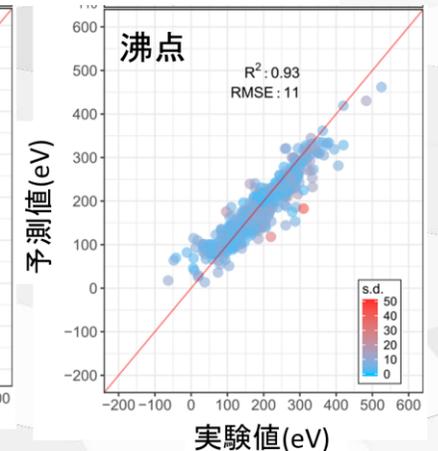
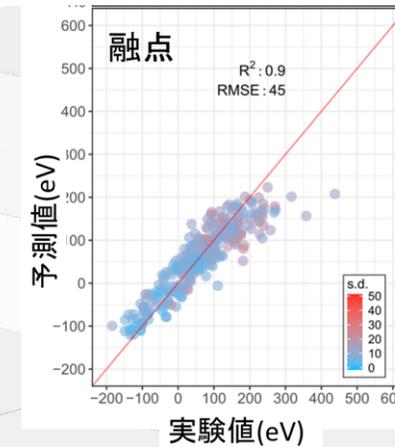
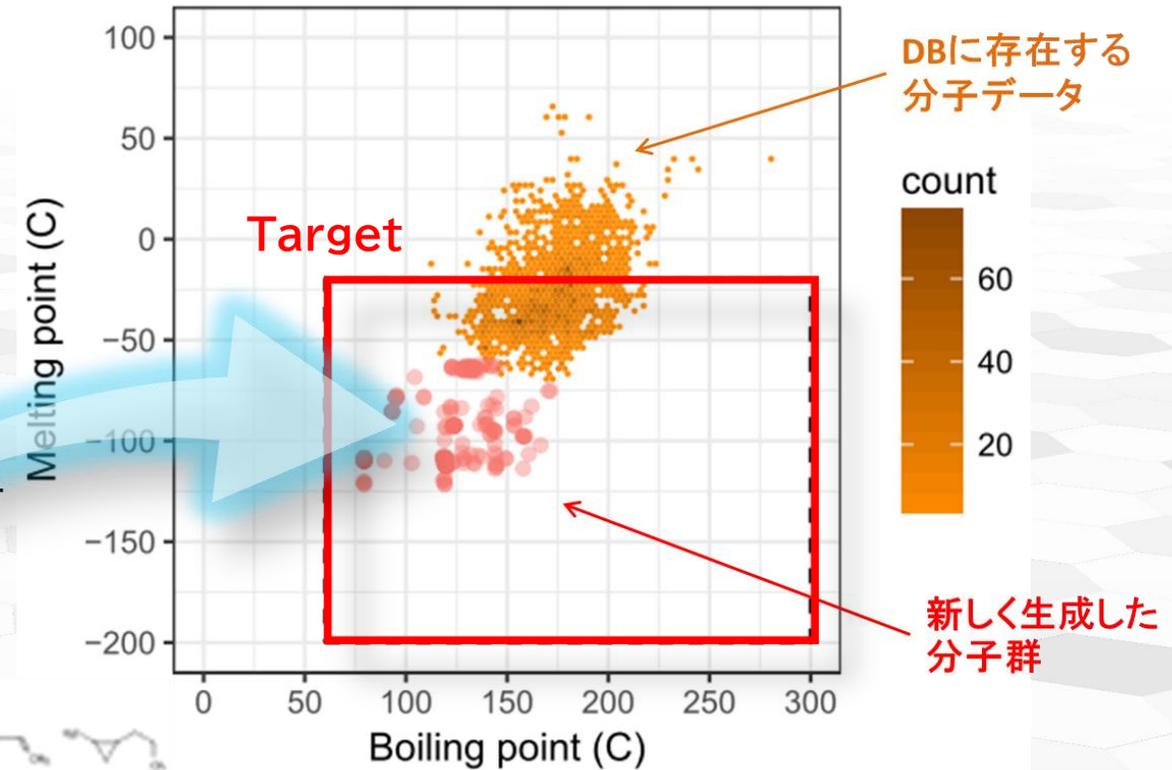
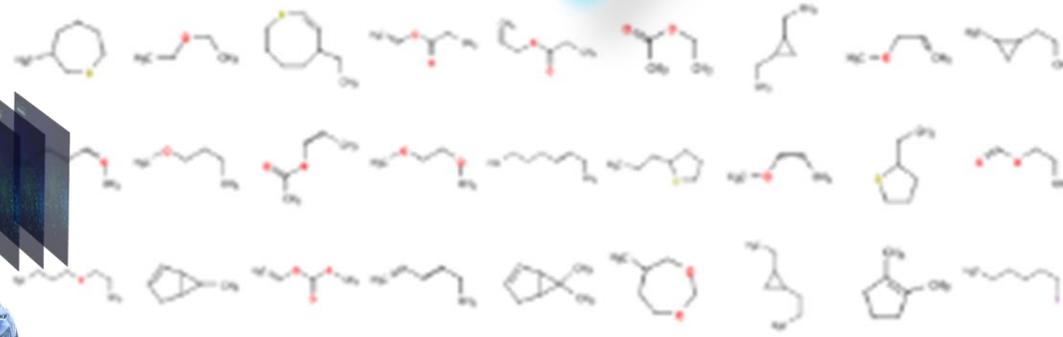
WP1-ii) 革新的新規材料の創生

- AIを用いた新規材料の自動大量提案 (SMILES-NEOプログラム(NIMS))
- 得られた材料の機能を機械学習により高速に予測 (SMILES-Xプログラム(NIMS))

Ex.) 人の直感に依らない新分子の提案



AIによる新規分子の創生

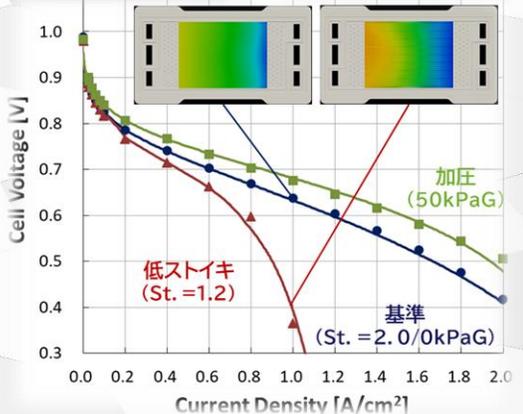
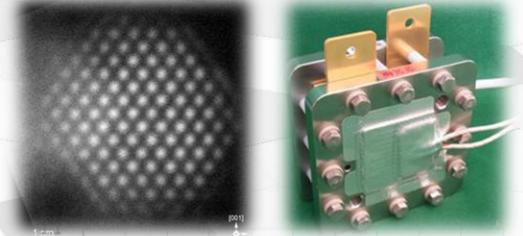
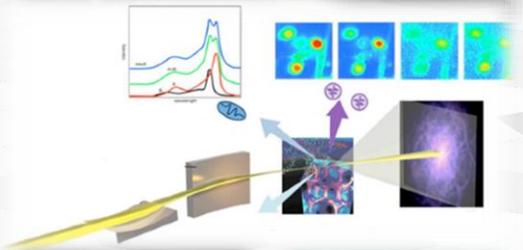


材料・MEAの評価解析項目

材料分析/解析Gr

電気化学的
特性測定Gr

	手法	取得できる情報	適用材料例	
放射光分光 (SPring-8)	粉末X線回折	XRD	結晶構造、合金化度	触媒
	X線吸収分光	XAFS	局所構造、価数、合金化度	
	X線小角散乱	SAXS	平均粒子径、分布	
	X線全散乱	PDF	非晶質構造、粒子径分布	電解質膜
	硬X線電子分光	HAXPES	電子状態、d-band center	
	X線小角/広角散乱	SAXS/WAXS	微細高次構造、結晶構造、配向度	
	軟X線X線吸収分光	XAFS	官能基	
顕微鏡	透過電子顕微鏡	TEM/STEM	結晶構造/ひずみ、粒子形状/分布	触媒
	電子回折	ED	局所結晶構造	
	エネルギー分散型X線解析	EDX	元素分布	
	電子エネルギー損失分光	EELS	局所電子状態	MEA
	トモグラフィー	3D-TEM	3次元構造可視化	
	クライオ電顕観察		アイオノマ被覆状態など	
	FIB-SEM		3次元構造可視化	
振動分光	ラマン分光/IR	構造、官能基	電解質	
電気化学	オペランド電気化学分光		in-situ反応状態	触媒
	回転ディスク電極	RDE	触媒活性	
	MEA評価		BOL/EOL性能@AST	MEA



WP2: モデル駆動材料設計

- A) 材料改良方針
- D) 革新材料創生

- B) 現象の可視化
- C) 現象の予測
- D) 革新材料創生

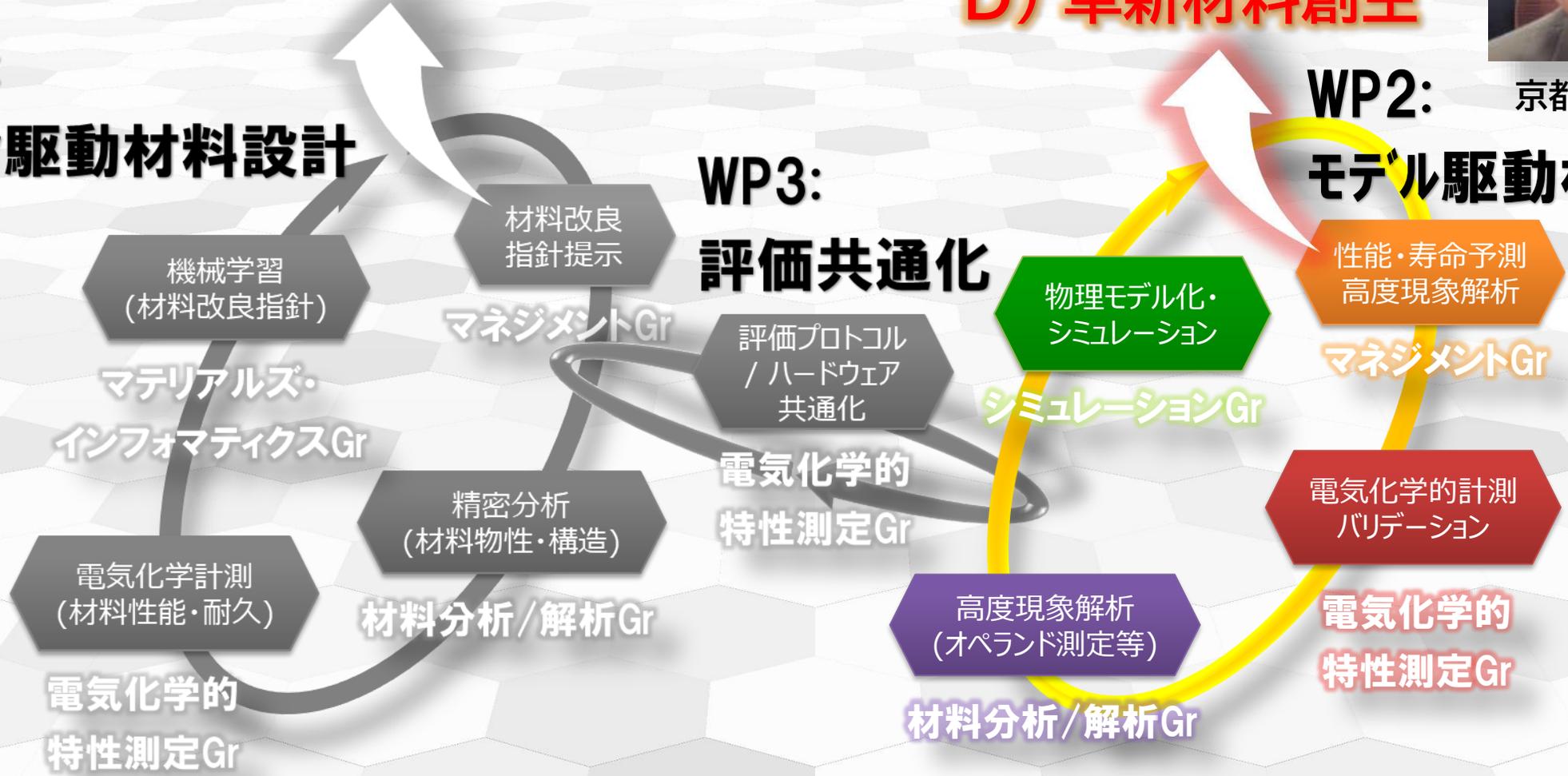


京都大学 河瀬

WP1: データ駆動材料設計

WP3: 評価共通化

WP2: モデル駆動材料設計



WP2: モデル駆動材料設計



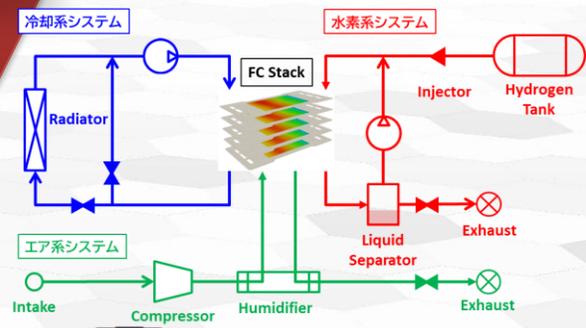
オペランド現象解析

数理モデル



バリデーション

性能・寿命予測

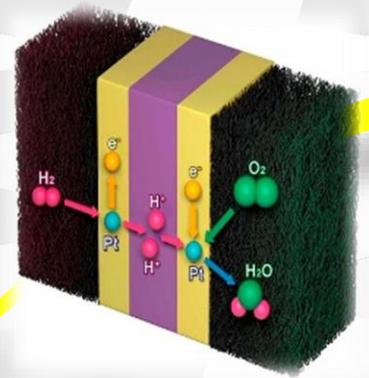


動力特性

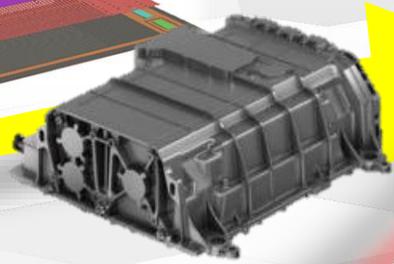


材料・プロセス

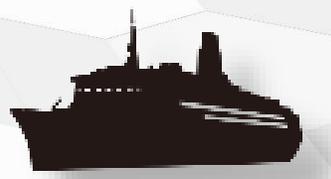
MEA



セル・スタック



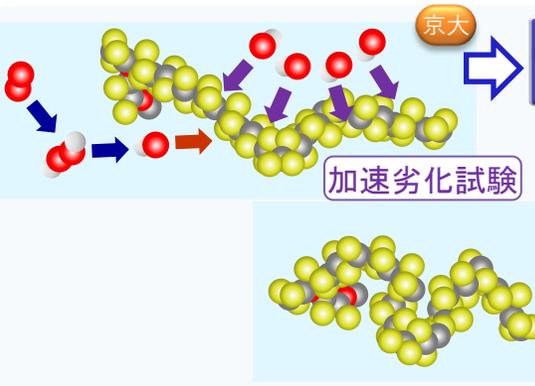
革新材料設計



☆ 多用途展開にも活用

スタックシミュレータ

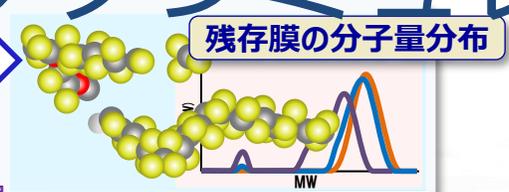
物理化学モデル
をベースとした
モデル構築



PEM化学劣化シミュレーター

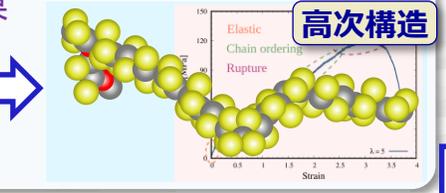
PEMの分子量分布に着目

化学変化と機械変化の相乗効果



応力下の高次構造変化シミュレーター

東北大



運転条件

PEMの化学・機械劣化連成シミュレーター

京大
東北大

分子量分布の経時変化



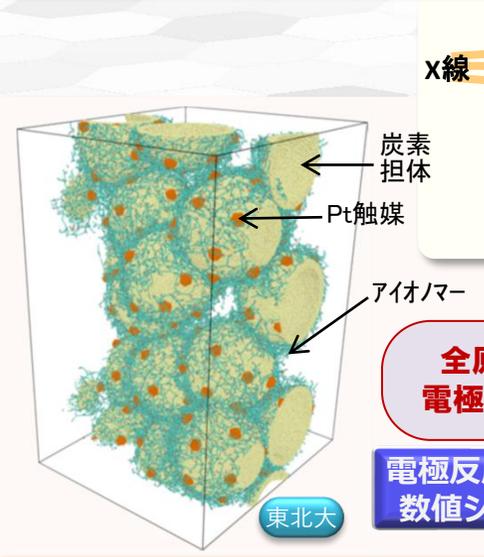
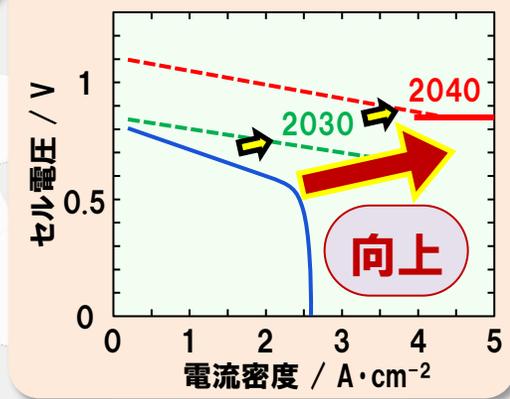
劣化

性能
材料, 製造条件

製造プロセスから発電性能を予測するマルチスケールシミュレーター

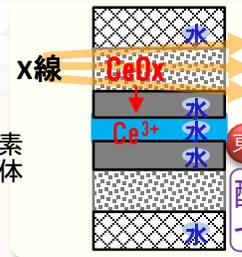
東北大 九大 東大

IV性能



全原子での電極反応計算
電極反応の大規模数値シミュレーション

東北大

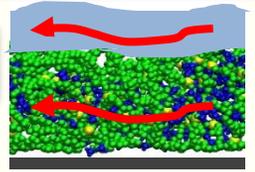


セリウムイオン分布予測シミュレーター

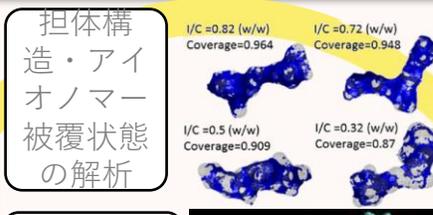
東工大

東北大

Ce分布の経時変化



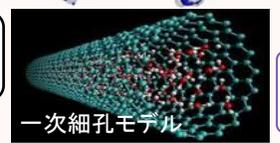
クエンチャー分布の計測と予測



担体構造モデル

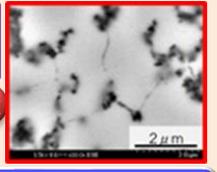
東北大
九大 京大

液水飽和度解析



担体細孔内水状態

触媒インクからの触媒層構造形成過程の計測



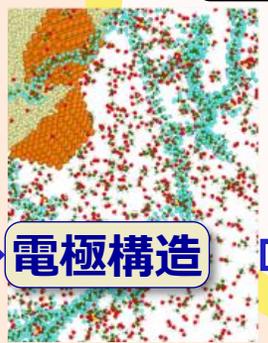
東工大

製造条件

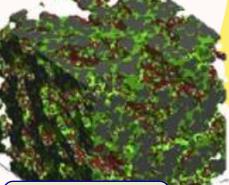
触媒層構造形成過程のプロセスシミュレーター

東北大

電極構造

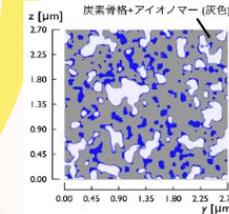


構造探索可能に



電極構造モデル

東大
九大
東北大



触媒層内液水飽和モデル

東大 東北大

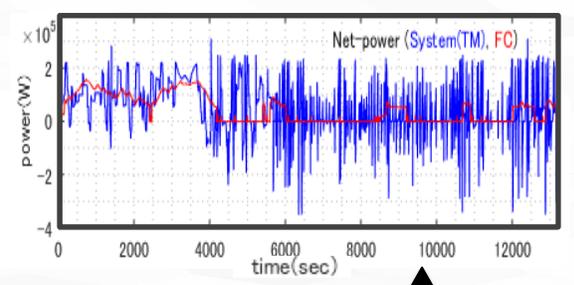
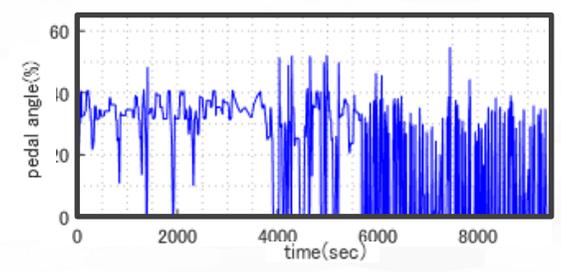
アイオノマーの酸素透過抵抗の計測

京大

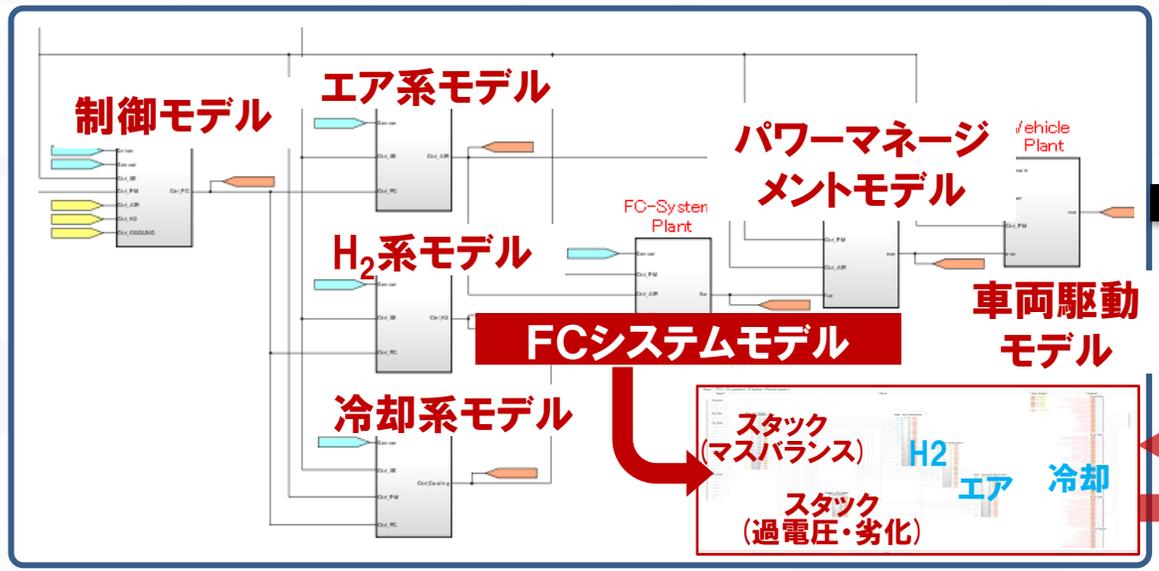
MBD (乗用車の例)

要求特性・外部環境

- アクセル開度
- 走行パターン
- 外部環境 (温度、湿度、圧力)



バーチャル車両



- スタック出力
- 車両加速性能
- システム劣化

システム・車両挙動

“シミュレーション”予測する”と解析”見る”の連結



日産アーク 今井

マイクロモデル

現象説明

- ・反応分子動力学法
- ・分子動力学法
- ・粗視化動力学法
- ・格子密度汎関数法

モデル導入

マクロモデル

酸素濃度分布

液水輸送方程式

- ・CFD
- ・FEM
- ・マルチブロック

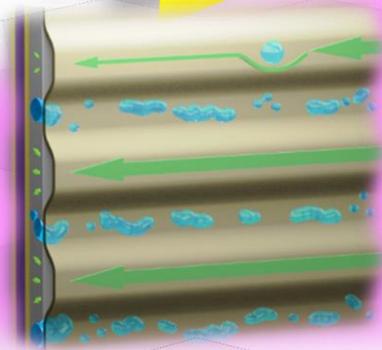
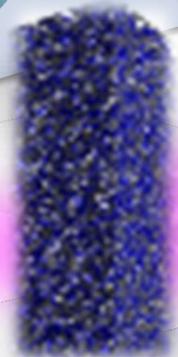
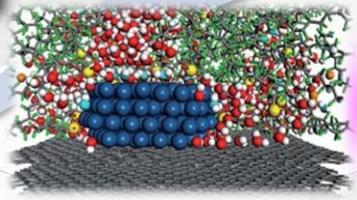
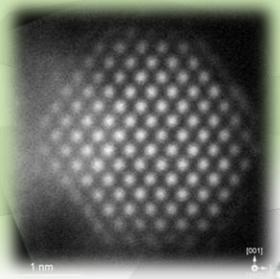
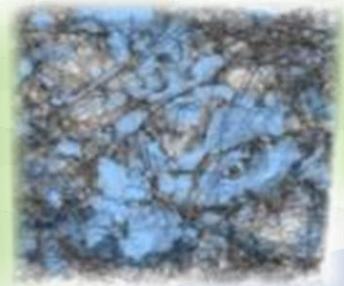
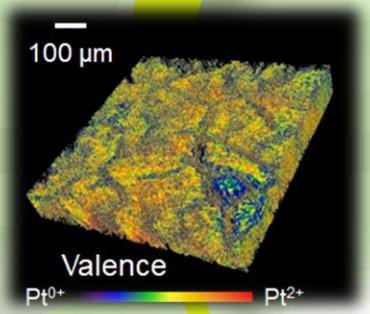
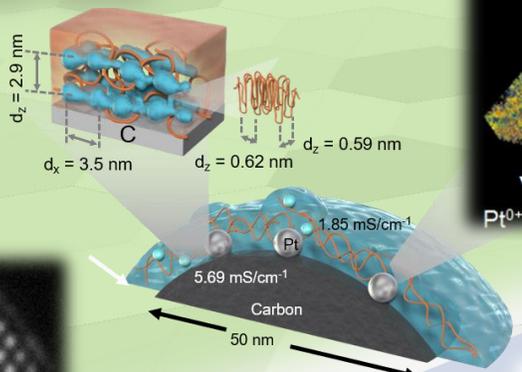
実装体系化

現象シミュレーション

発電性能

- ・性能
- ・膜寿命
- ・性能低下

放射光X線



nm

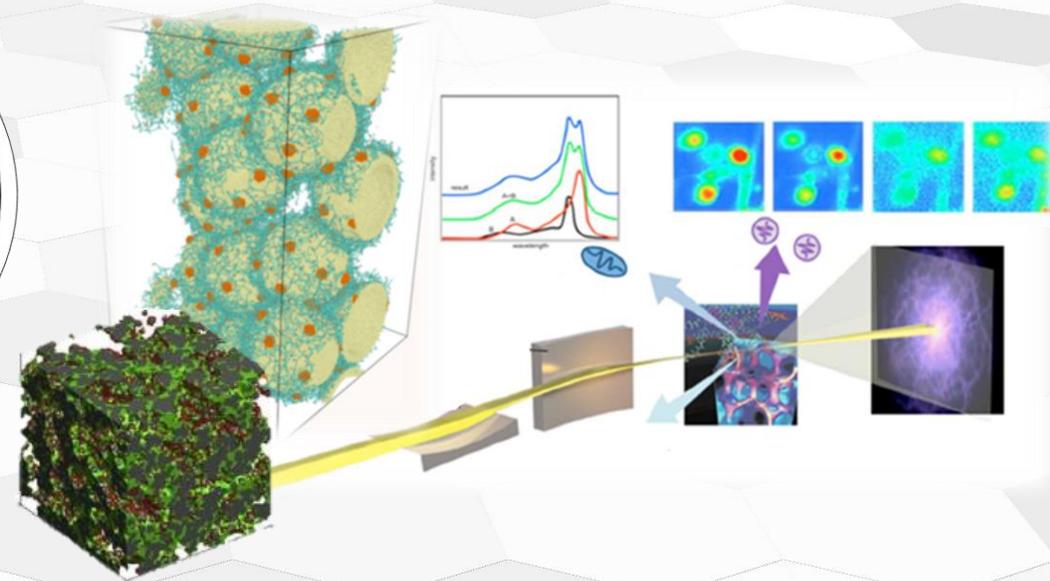
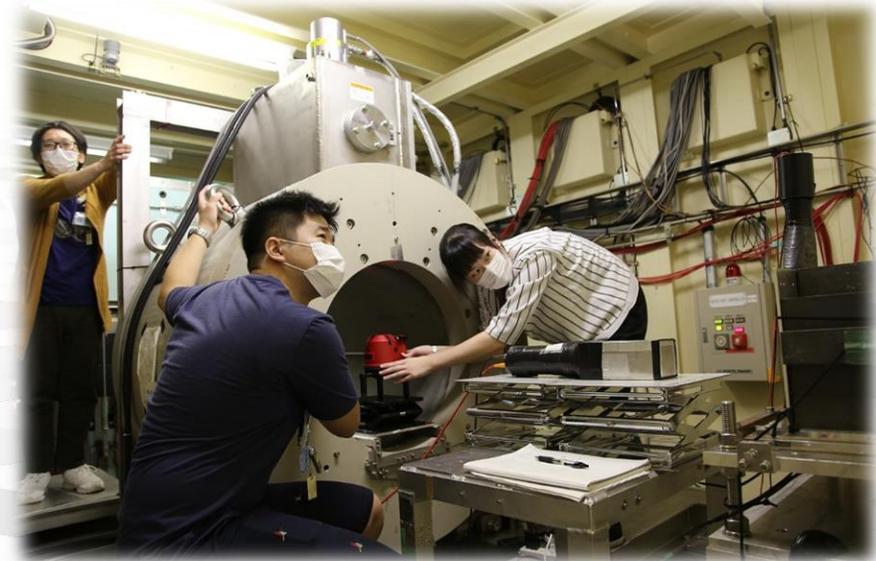
μm

mm

cm

中性子線

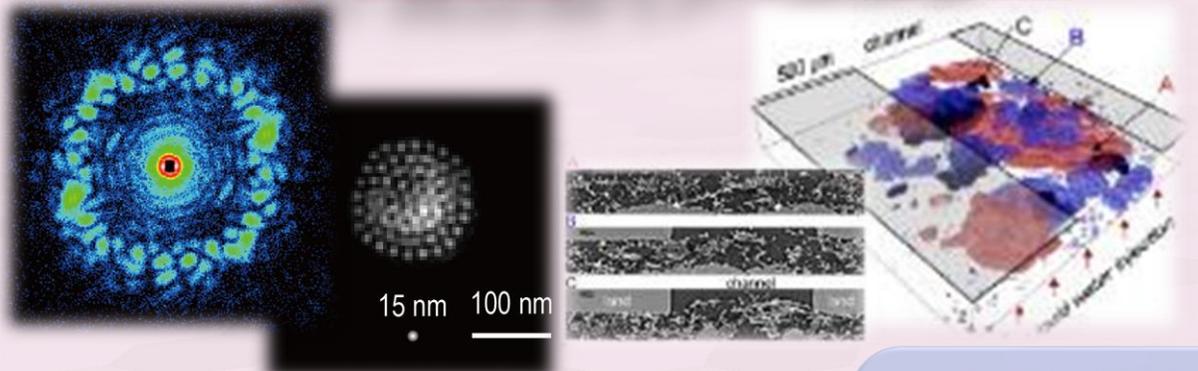
放射光X線/ SPring-8・SACLA



無機系材料(触媒・担体・GDL)に強み

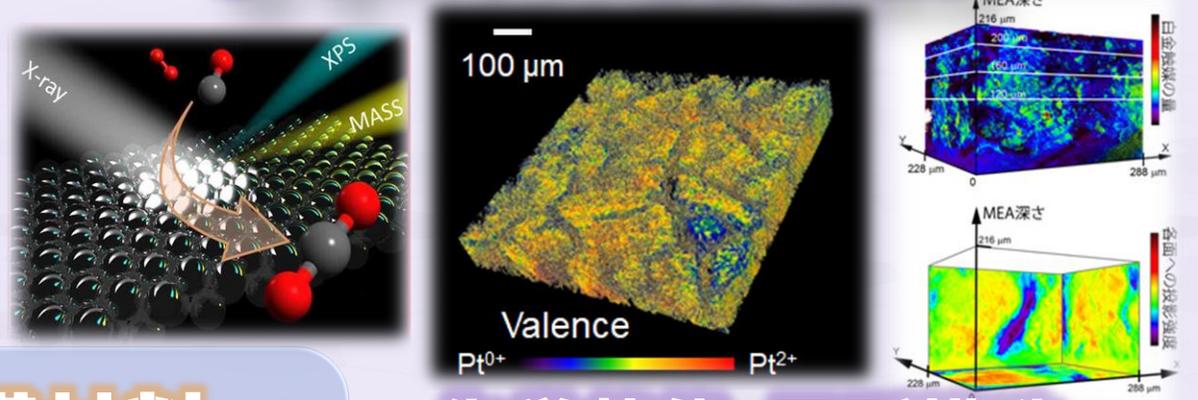
放射光X線解析への期待

① 高分解イメージング



超微細構造、液水分布

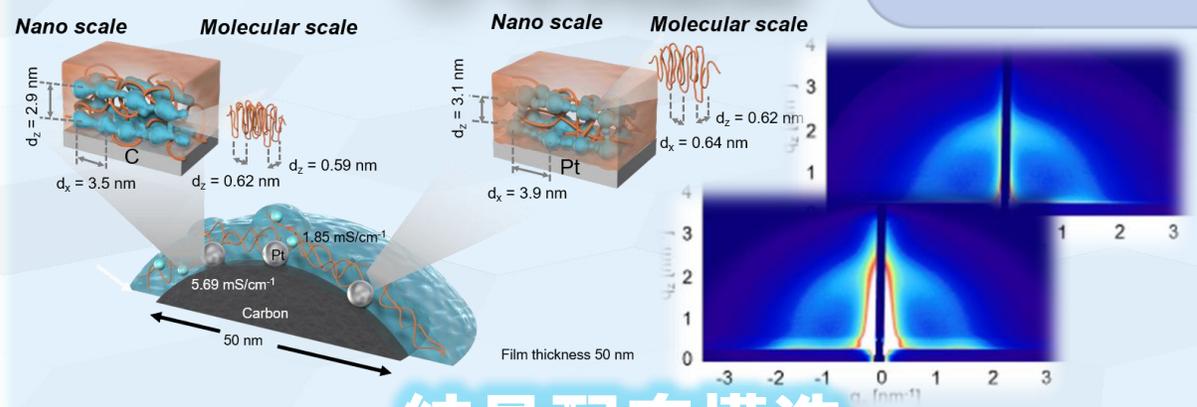
② オペランド反応可視化



化学状態・局所構造

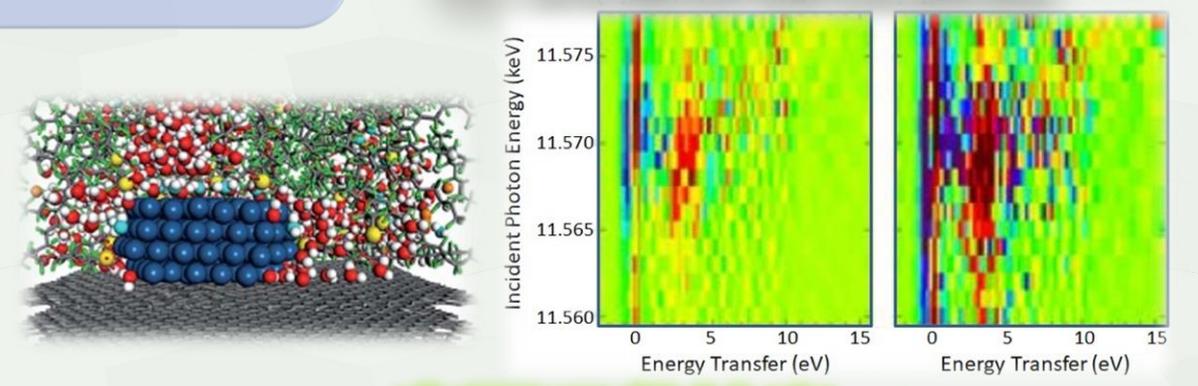
無機触媒材料・
触媒反応の解析

③ 小角散乱



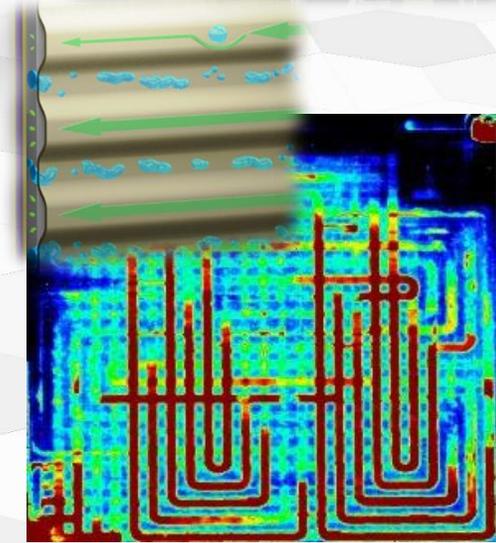
結晶配向構造

④ 共鳴非弾性散乱



表面吸着被毒

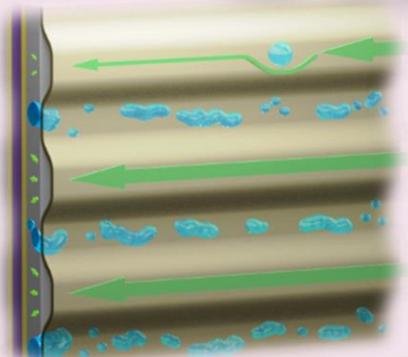
中性子線/ J-PARC



有機系材料(電解質高分子)と水に強み

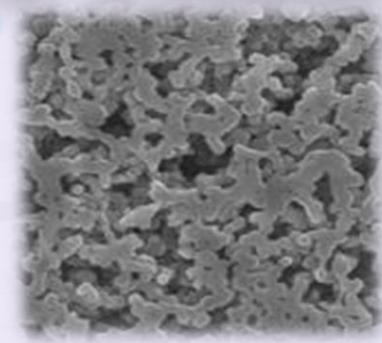
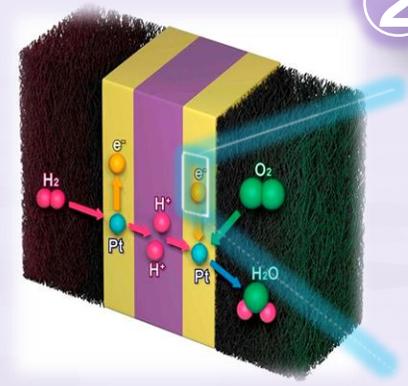
中性子解析への期待

① ラジオグラフィー



液水分布、氷点下現象

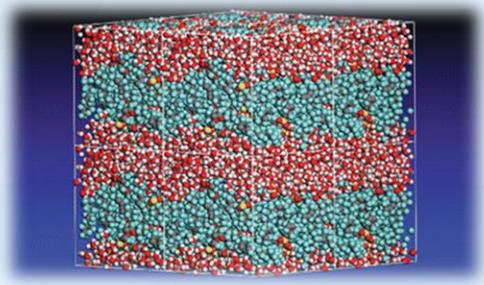
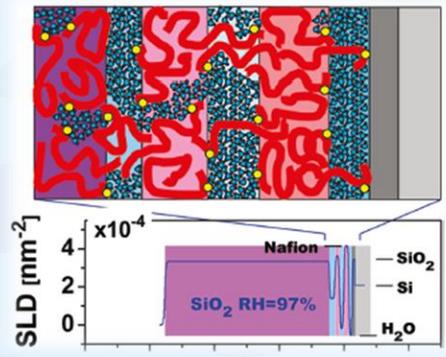
② 小角散乱



多孔質構造、インク構造

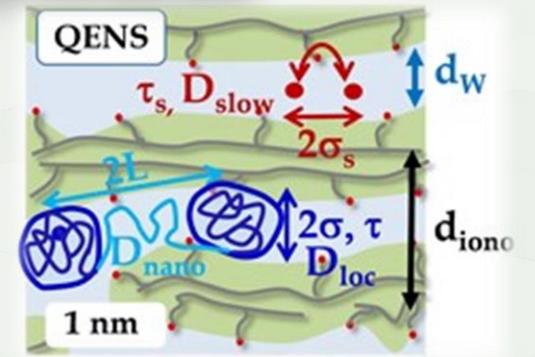
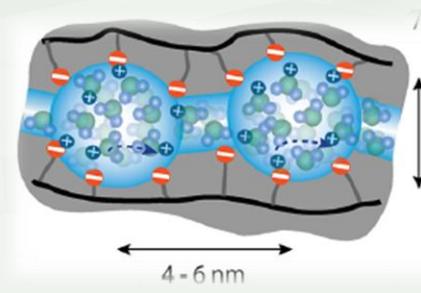
有機高分子材料・
水/氷の解析

③ 反射率



高分子超薄膜構造

④ 準弾性散乱



輸送ダイナミクス

各国の中性子解析検討例



National Institute of Standard and Technology

Paul Scherrer Institute

Water Imaging in Mirai Short-Stack provided by USCAR

USCAR/LANL (FC-PAD) Collaboration

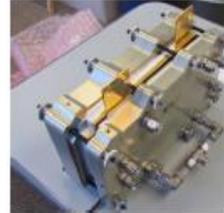
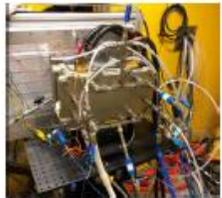
Water Measurements of State-of-Art Commercial Stack

LANL: Kavi Chintam, Derek Richard, Andrew Baker, Rod Borup

USCAR: Dave Masten, Sinichi Hirano, Chunchuan Xu

GM: Joe Fairweather

USCAR Matrix of Operating Conditions

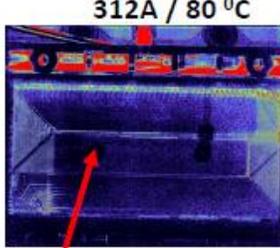
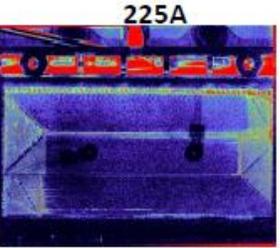
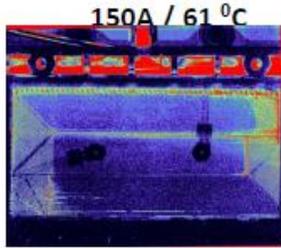
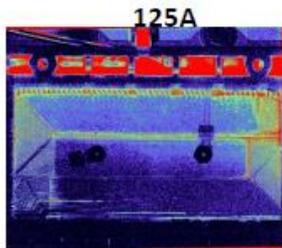
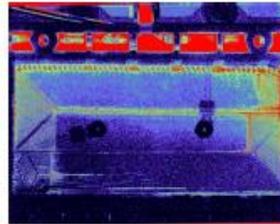
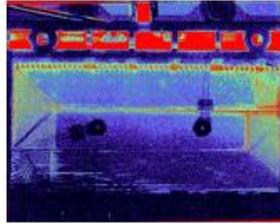
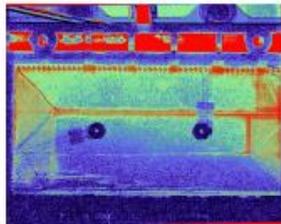
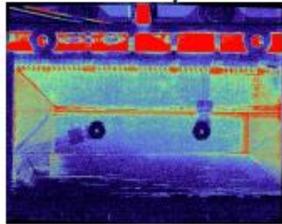


50A / 58 °C

70A

87.5A

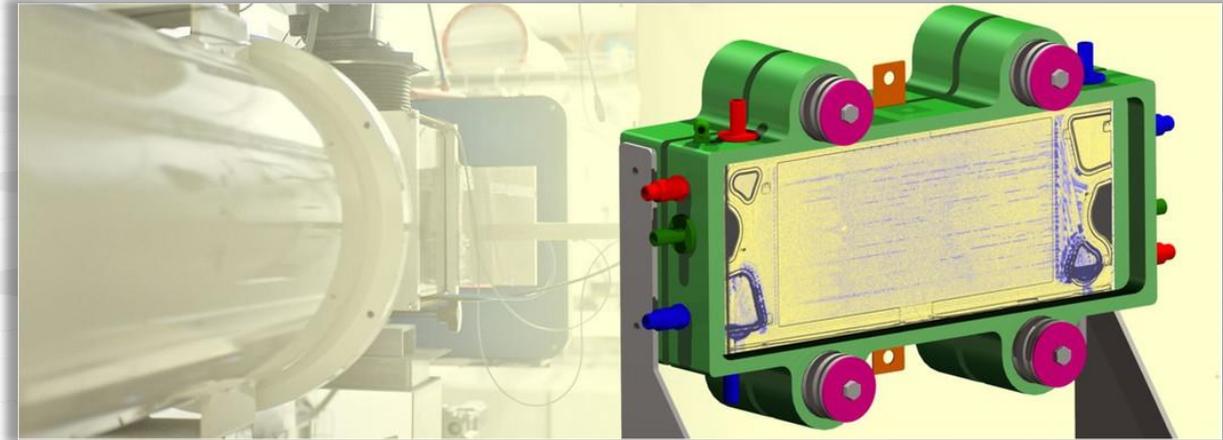
105A



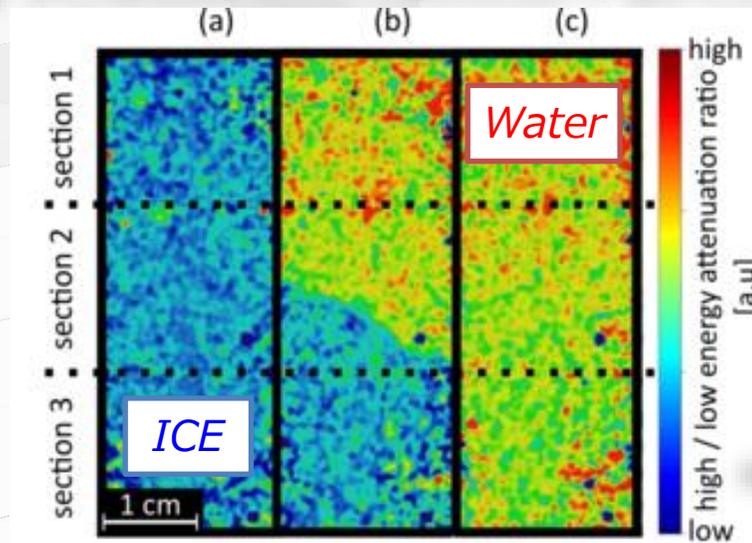
Notes: 12.5 Amp point, unstable
450 Amp point insufficient H2

High Current & Flowrates
show much less liquid water
than low current/flowrates

18



● POWERCELL (300cm²) @FCH-JUプロジェクト



● 水/氷を区別する イメージング

● トヨタ/ MIRAI (250cm²) @DOEプロジェクト

連携体制による解析強化

NEDOプロジェクト

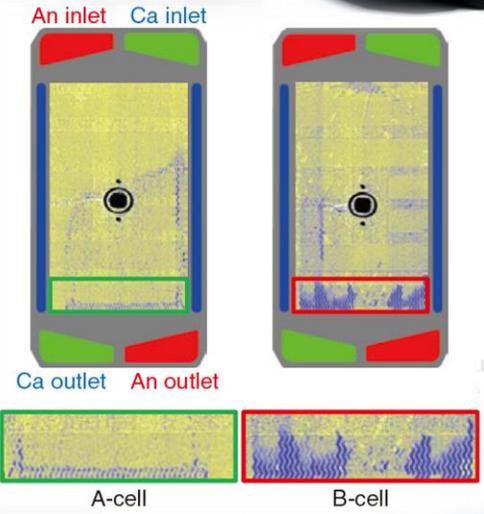
Registered Institution for Facilities Use Promotion
Japan Synchrotron Radiation Research Institute

JASRI

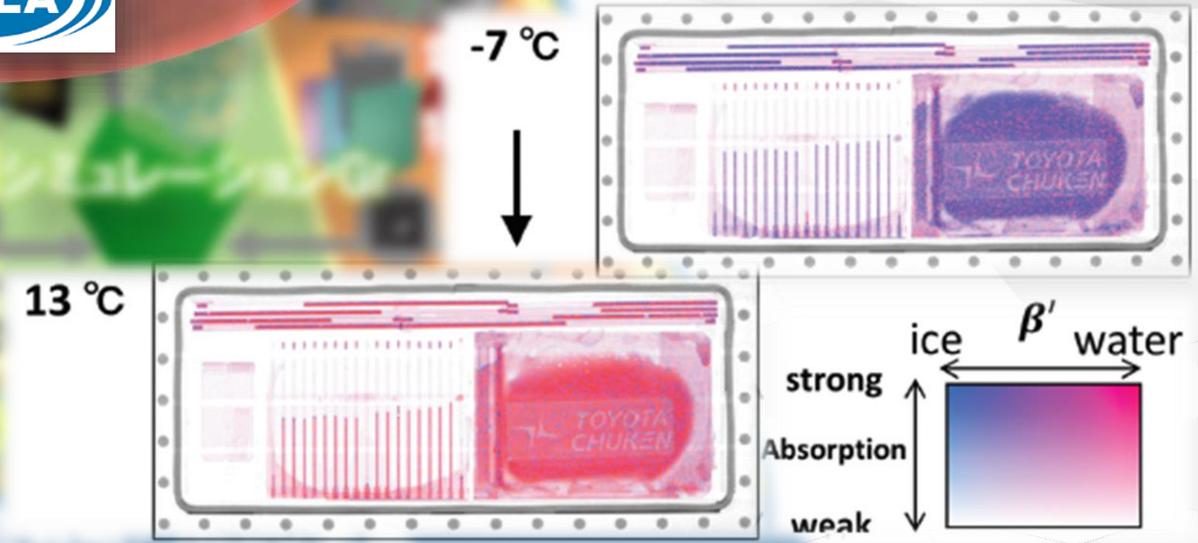
企業

豊田中央研究所

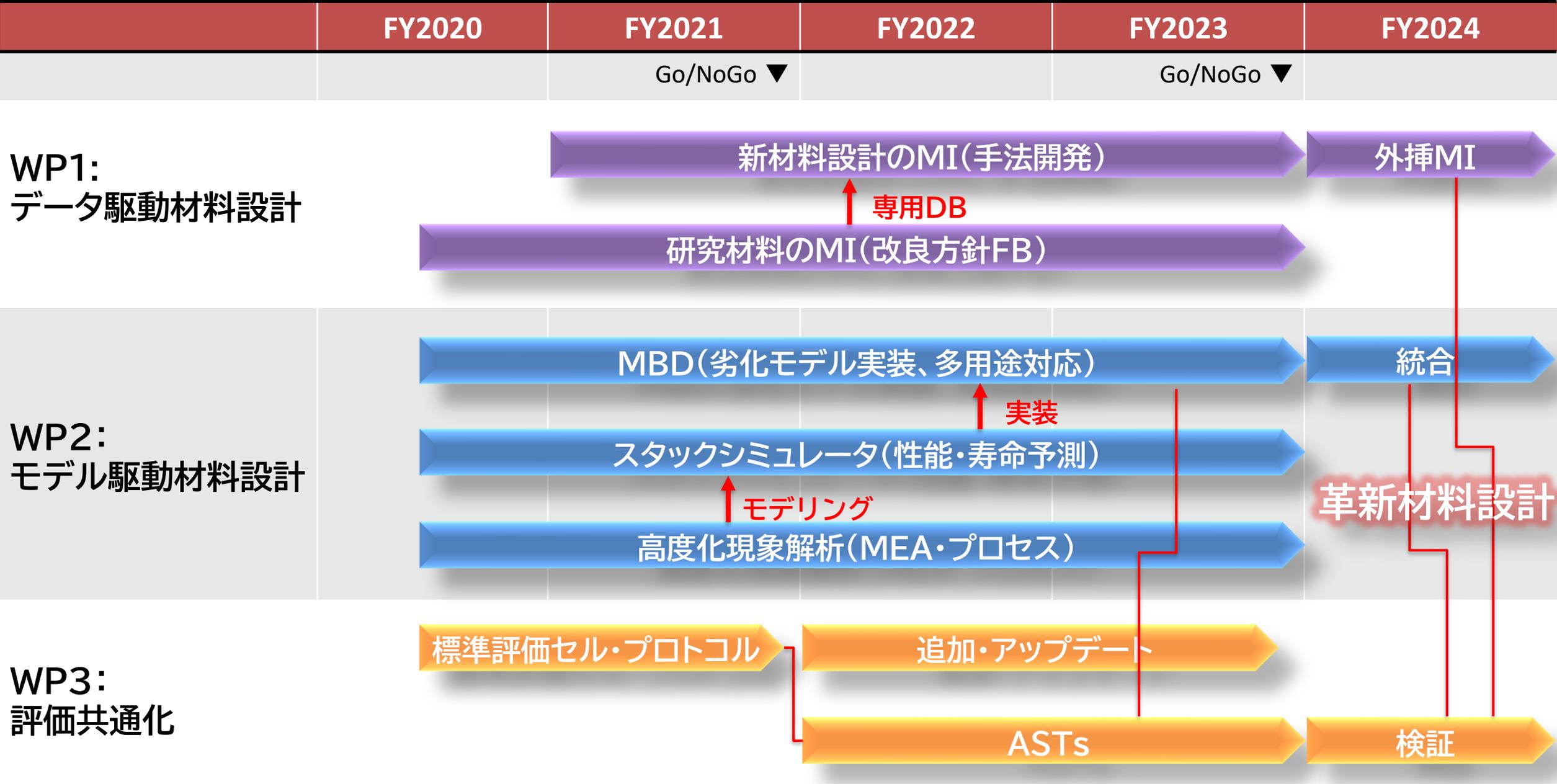
中性子解析施設



豊田中央研究所



計画



まとめ・今後の予定

<まとめ>

- 日本で初となる、PEFC研究コンソーシアムをスタート。
オールジャパン取り組みのロールモデルを目指す。
- “点”として存在する日本のFC研究を繋げていき、“面”の活動で成果拡大する。さらに面を広げていく。

<今後の予定>

- 評価解析PFで新型MIRAIセル・MEAを徹底解析する。
(今後のオープンシンポジウムで紹介する)

ご清聴をありがとうございました