

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
通称:「革新FC事業」

PEFC評価解析プラットフォームの取り組み



技術研究組合 FC-Cubic

先端解析技術推進部

竹内 仙光



建屋全景



TEM



耐久評価設備

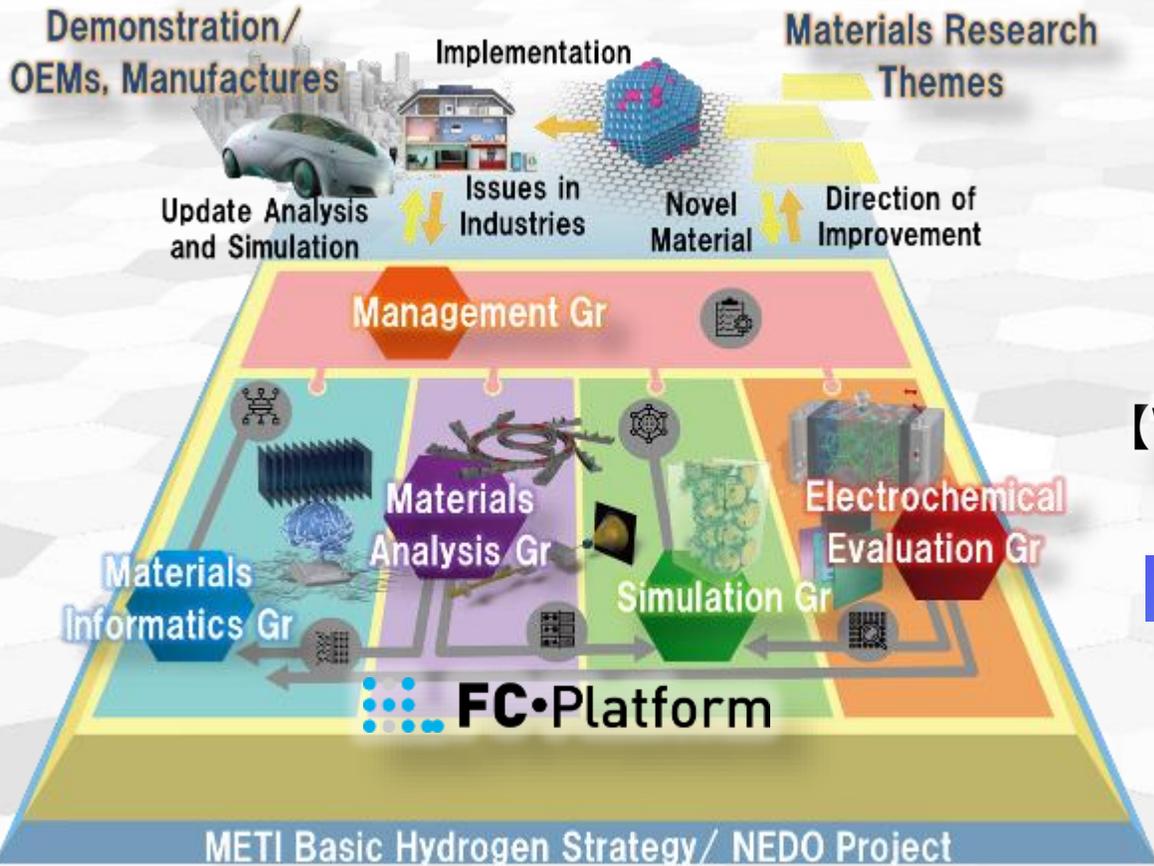


MEA 高温性能評価ベンチ

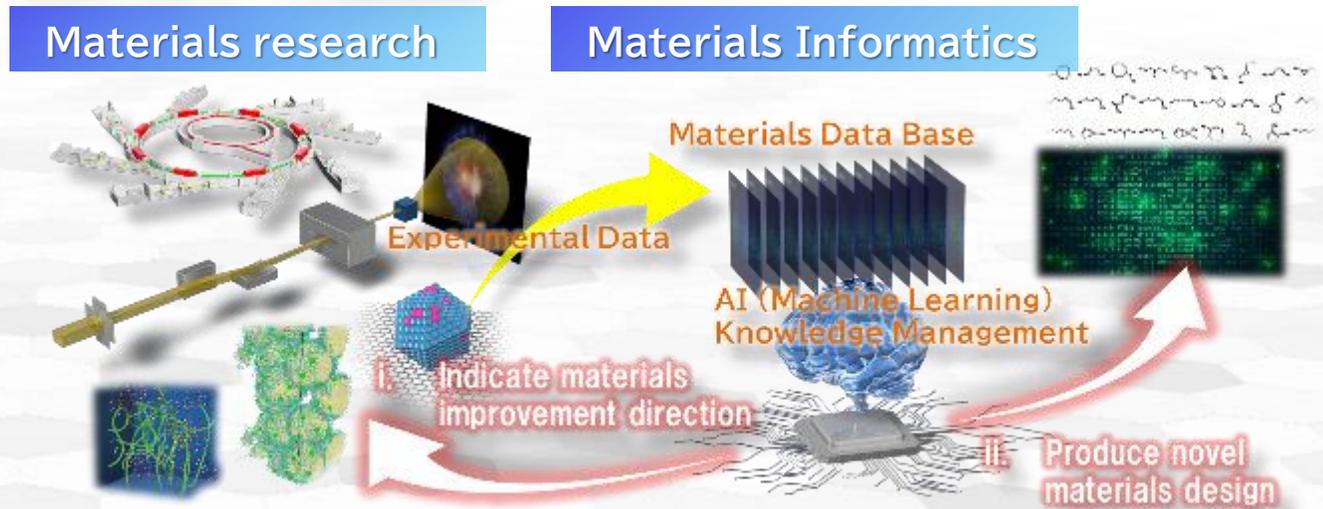


MEA 高温性能評価ベンチ

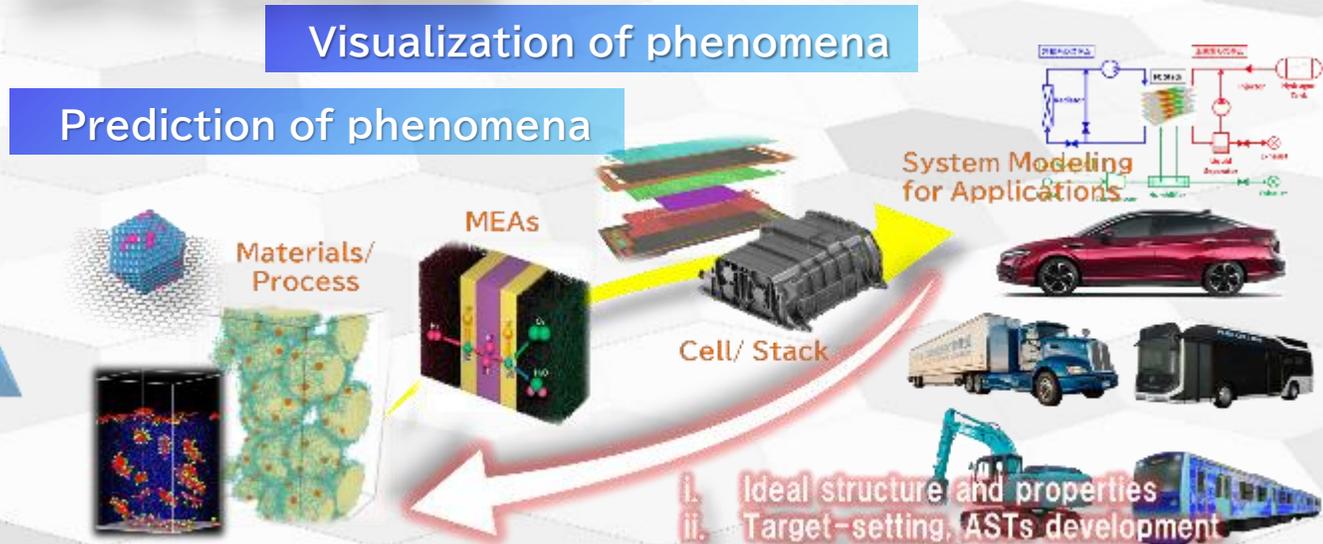
日本の水素技術の盛り上げ
産学連携の強化



【WP1】データ駆動型



【WP2】モデル駆動型



PEFC評価解析プラットフォームメンバー



Management Gr



N. Takeuchi



M. Yamauchi



J. Takano



M. Yoneda

Electrochemical Evaluation Gr



K. Shinohara



T. Asaoka



H. Kanesaka



T. Mikami

Simulation Gr



M. Kawase (Prof.)



M. Kubo (Prof.)



T. Tokumasu (Prof.)



S. Hirai (Prof.)



G. Inoue (Assoc. Prof.)



I. Kinefuchi (Assoc. Prof.)

Materials Informatics Gr



K. Sodeyama (Prof.)



M. Matsumoto

Materials Analysis Gr



H. Imai



Y. Uchimoto (Prof.)



Y. Sakurai (Prof.)



T. Otomo (Prof.)



Y. Iwasawa (Prof.)

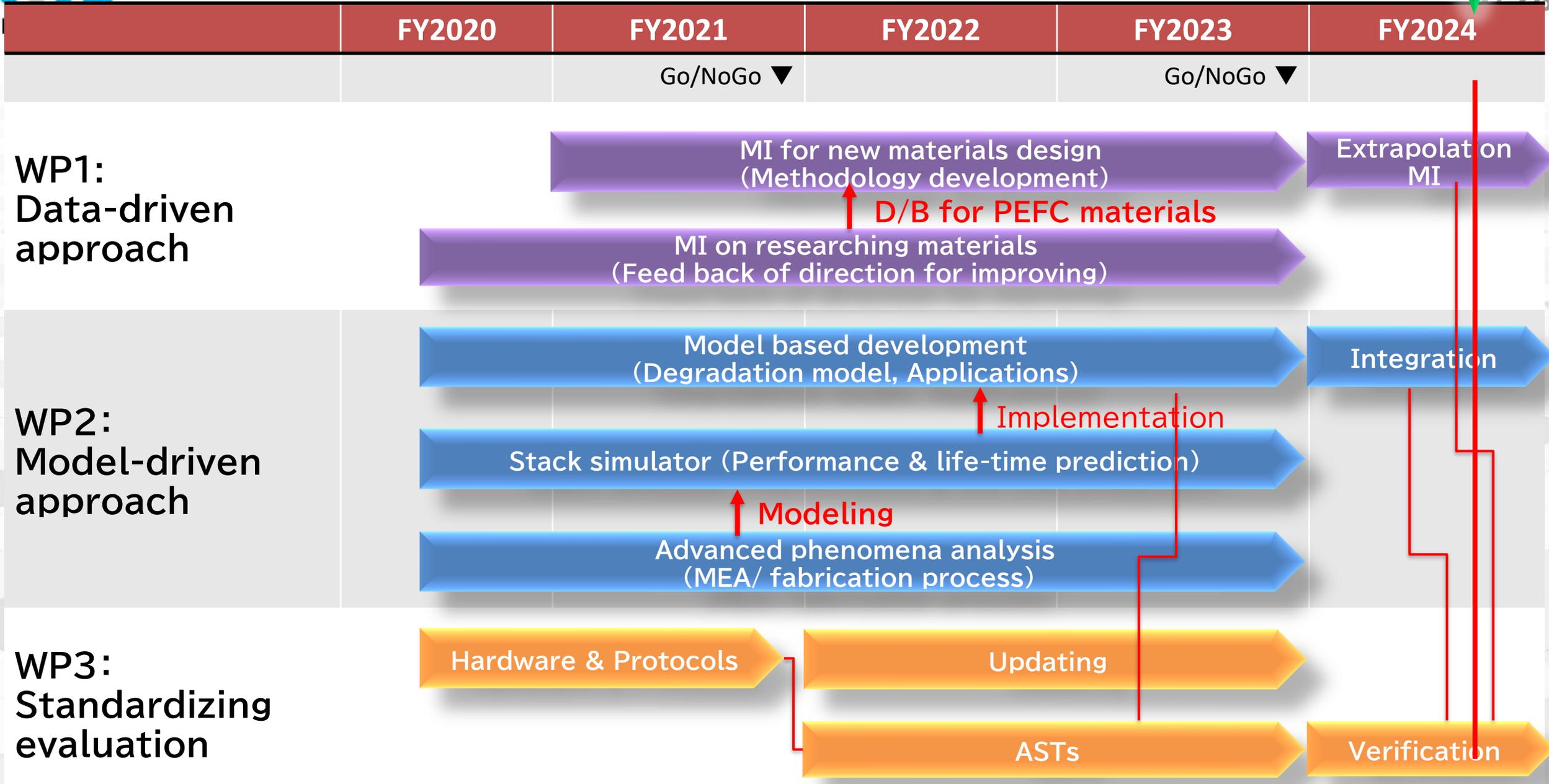


M. Tada (Prof.)



A. Kuwabara

PEFC評価解析プラットフォーム計画



1. NEDOのFCV・HDV技術ロードマップ

2. PEFCプラットフォーム活動

WP1: データ駆動型なアプローチ

マテリアルズ・インフォマティクス(MI)

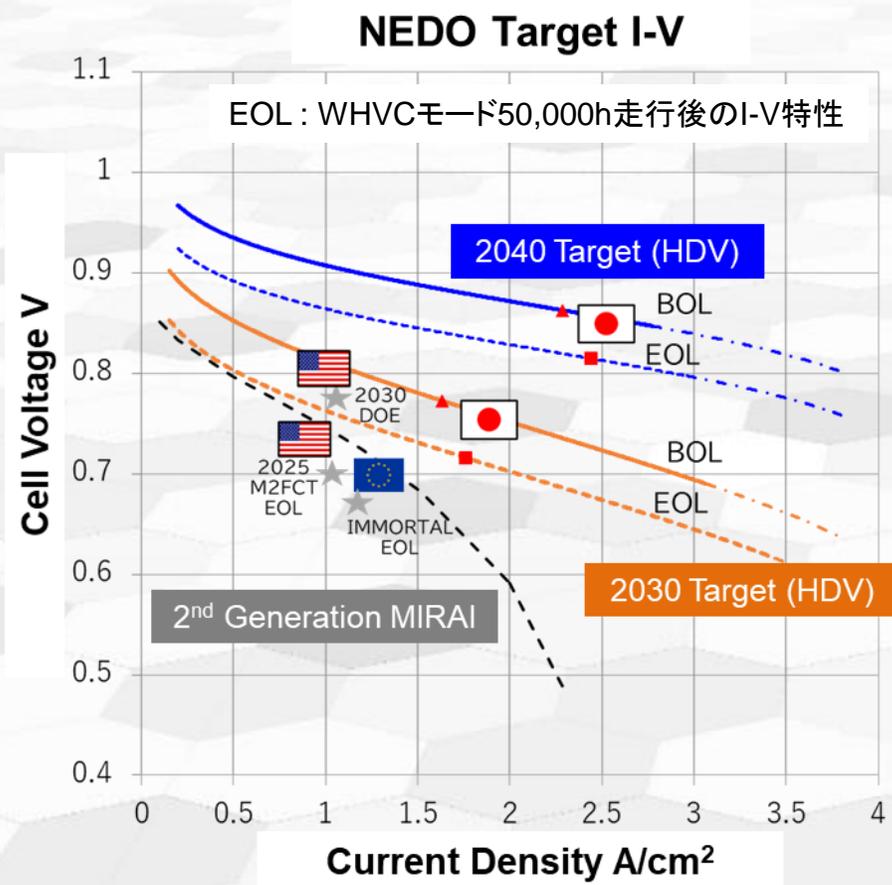
WP2: モデル駆動型アプローチ

モデリングとシミュレーション

WP3: 評価の標準化

2030年頃および2040年頃のFCスタックの技術目標

- 2030年頃および2040年頃の技術目標 (I-V目標、作動条件、耐久性、コスト)を設定
- 2040年のI-V目標に対しては、材料のみならずラジエータ能力向上、走行抵抗低減、エアコンプレッサ、水素・水ポンプ、ラジエータファン等のBOPの補機消費電力低減などシステムの進化を考慮

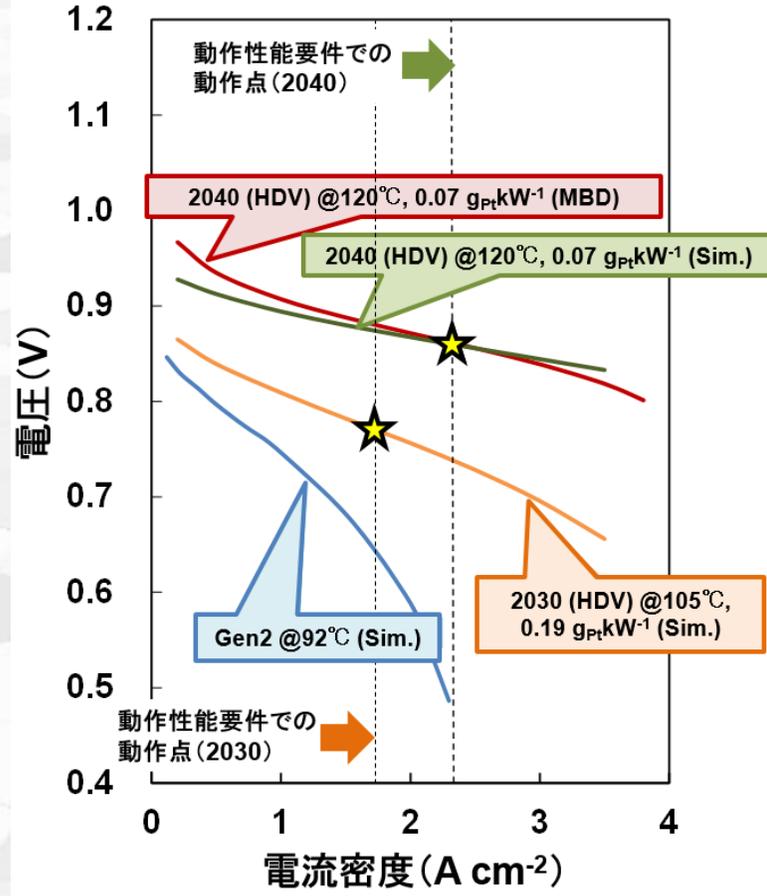


項目	2030年頃の目標	2040年頃の目標
FCスタック性能		
I-V要求性能 ^{*1}	BOL: 0.77V@1.63 A/cm ² EOL: 0.72V@1.76 A/cm ²	BOL: 0.86V@2.29 A/cm ² EOL: 0.81V@2.44 A/cm ²
作動温度範囲	起動最低温度: -30°C (外気) 作動最高温度: 105°C (冷却水出口温度)	起動最低温度: -30°C (外気) 作動最高温度: 120°C (冷却水出口温度)
入口湿度	20%RH	12%RH
耐久性	50,000 h	50,000h
コスト		
FCシステム	0.9 万円/kW ^{*2}	
(FCスタック)	0.45 万円/kW ^{*2}	
Pt量	0.19 g/kW ^{*3}	0.07 g/kW ^{*4,*5}

*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特性上の熱定格動作点
 *2 大型トラック年産10万台前提のコスト、水素貯蔵システム、二次電池、インバータ、モータ等の電動化部品を含まない
 *3 Pt目付量0.24 mg/cm²としてスタック1基あたりの定格出力114 kW, MEA面積273 cm², 330セルを前提条件とした数値
 *4 Pt目付量0.14 mg/cm²としてスタック1基あたりの定格出力190 kW, MEA面積293 cm², 330セルを前提条件とした数値
 *5 2050年にはPtの資源循環可能なレベルまでの低減が必要

要求I-V性能を達成するための材料目標への割付

- 2Dシミュレーション (MEA厚さ方向+セル流れ方向) を用いて、HDV用燃料電池システム (w/加湿モジュール) を想定した場合のセルI-V性能と過電圧、および内部分布を予測し、各材料目標へ割付
- 動作点においてセル内部の温度は最大で冷却水出口温度+3~5°C、RH 20%~80%の範囲を考慮した材料開発が必要



主要材料	物性・特性	2030	2040
電解質膜	厚さ (μm)	8	1
	プロトン伝導率 (S/cm)	0.032 @120°C, 30%RH 0.12 @80°C, 80%RH	0.15 @55~125°C, ≥12%RH
	H ₂ 透過係数 (mol s ⁻¹ m ⁻¹ Pa ⁻¹)	8×10 ⁻¹⁵	4×10 ⁻¹⁵
空気極触媒層	厚さ (μm)	6	4
	Pt目付量 (mg/cm ²)	0.200	0.120
	質量活性 (A/g) @0.1 MPa _{O₂} , 100%RH, 80°C	1,740 (Gen2 MIRAI比 3.4倍)	39,000 (Gen2 MIRAI比 78倍)
	プロトン伝導率 (S/cm)	0.032 @120°C, 30%RH	0.15 @55~125°C, ≥12%RH
空気極GDL	酸素移動抵抗 (s/m)	10	8
	Pt溶解速度	—	× 1/30 (vs. 3nm of Pt particle)
	ガス移動抵抗 (s/m)	18	18

(※) 電解質膜のプロトン伝導率は補強材込、クエンチャ添加など、耐久性を担保した状態での伝導率。2030年目標との対比から120°Cの伝導率を示しているが、55~125°Cの範囲(湿度12%RH以上)で、この目標を満たすことが前提

1. NEDOのFCV・HDV技術ロードマップ

2. PEFCプラットフォーム活動

WP1: データ駆動型なアプローチ

マテリアルズ・インフォマティクス(MI)

WP2: モデル駆動型アプローチ

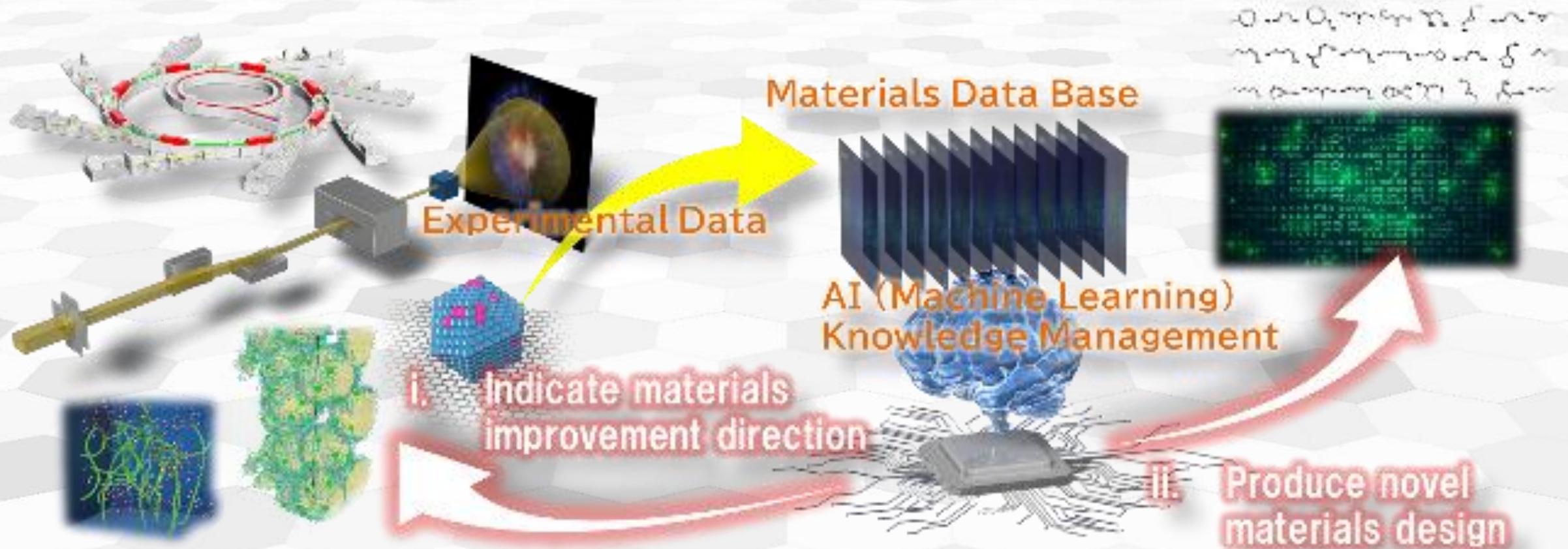
モデリングとシミュレーション

WP3: 評価の標準化

【WP1】 Data-driven

Materials research

Materials Informatics(MI)

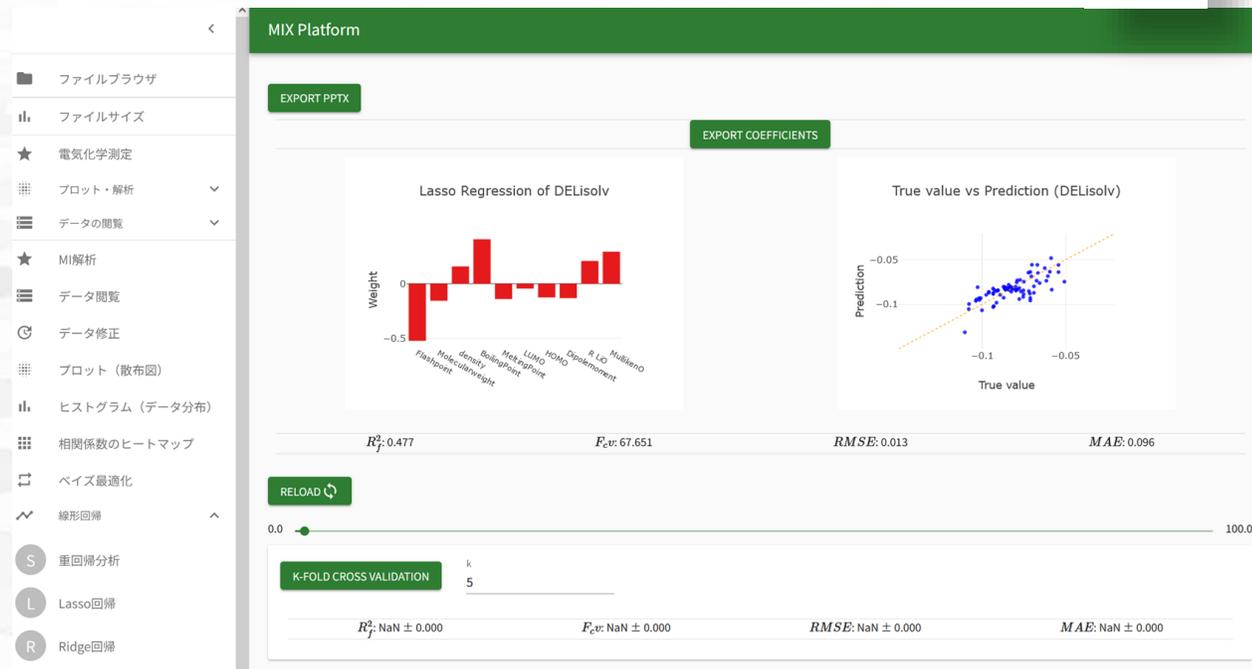


Materials Informatics(MI) accelerates Material R&D efficiently.

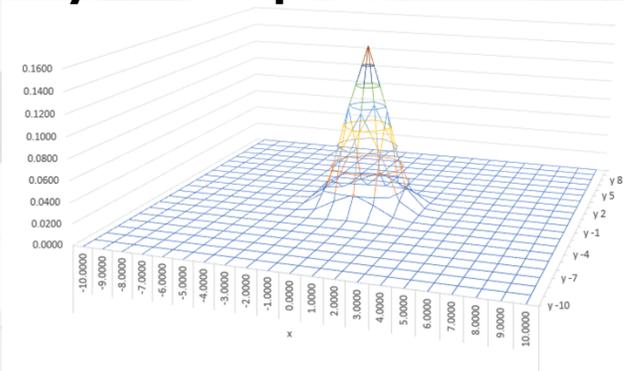
MIX-Platform



MIX-Platform

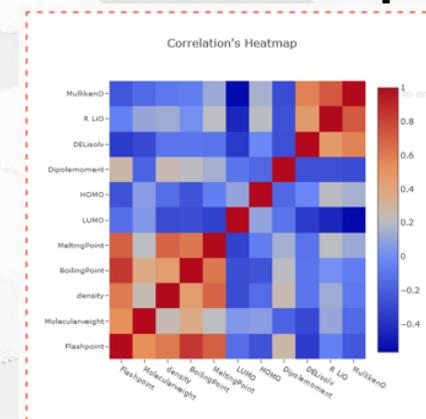


Bayesian optimization



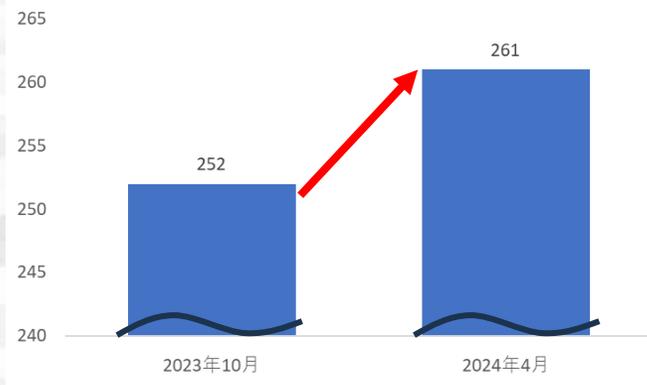
		-10.0000	-9.0000	-8.0000	-7.0000	-6.0000	-5.0000	-4.0000	-3.0000	-2.0000	-1.0000	0.0000	1.0000	2.0000	3.0000	4.0000	5.0000	6.0000	7.0000	8.0000	9.0000	10.0000		
	-10	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	
	-9	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	
	-8	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	
	-7	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	
	-6	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	
	-5	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	
	-4	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	
	-3	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0011	0.0018	0.0011	0.0002	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	-2	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0029	0.0131	0.0218	0.0131	0.0029	0.0002	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	-1	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0121	0.0121	0.0988	0.0988	0.0131	0.0011	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	0	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0018	0.0118	0.0988	0.0988	0.0218	0.0018	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	1	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0011	0.0131	0.0988	0.0988	0.0131	0.0011	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	2	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0002	0.0029	0.0131	0.0218	0.0131	0.0029	0.0002	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	3	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0011	0.0018	0.0011	0.0002	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	4	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	5	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	6	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	7	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	8	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	9	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	10	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

Relation Heatmap

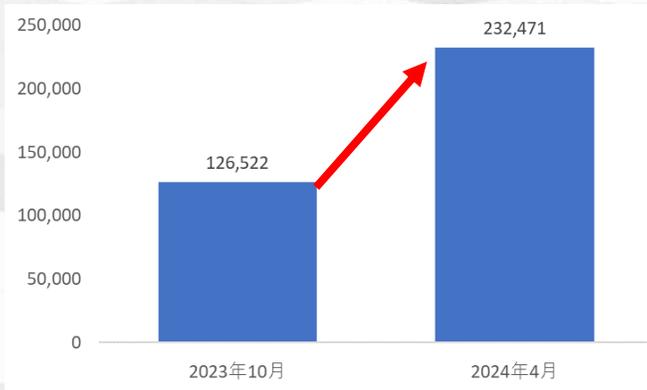


■ 利用者・データ件数の拡大

利用者数



データ件数

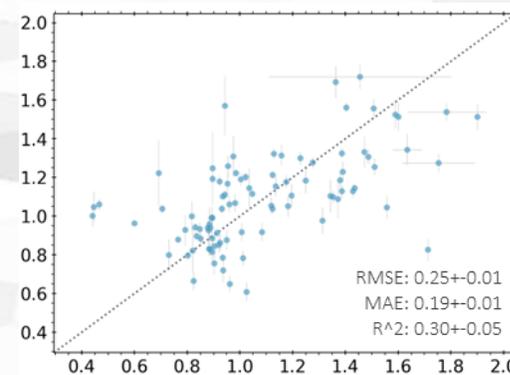


■ 成功事例の創出

表面修飾分子の探索 (AIST五百蔵先生)

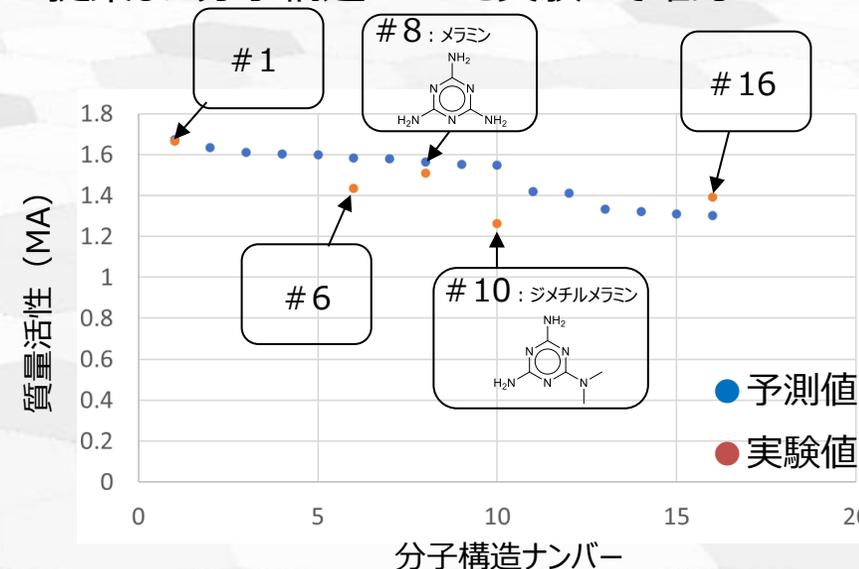
従来の実験データから、表面修飾分子の分子構造と質量活性 (MA) の関係を学習
 → 自動生成した分子構造のMAを予測し、16種類の分子構造をAISTに提案

予測モデルの交差検証結果



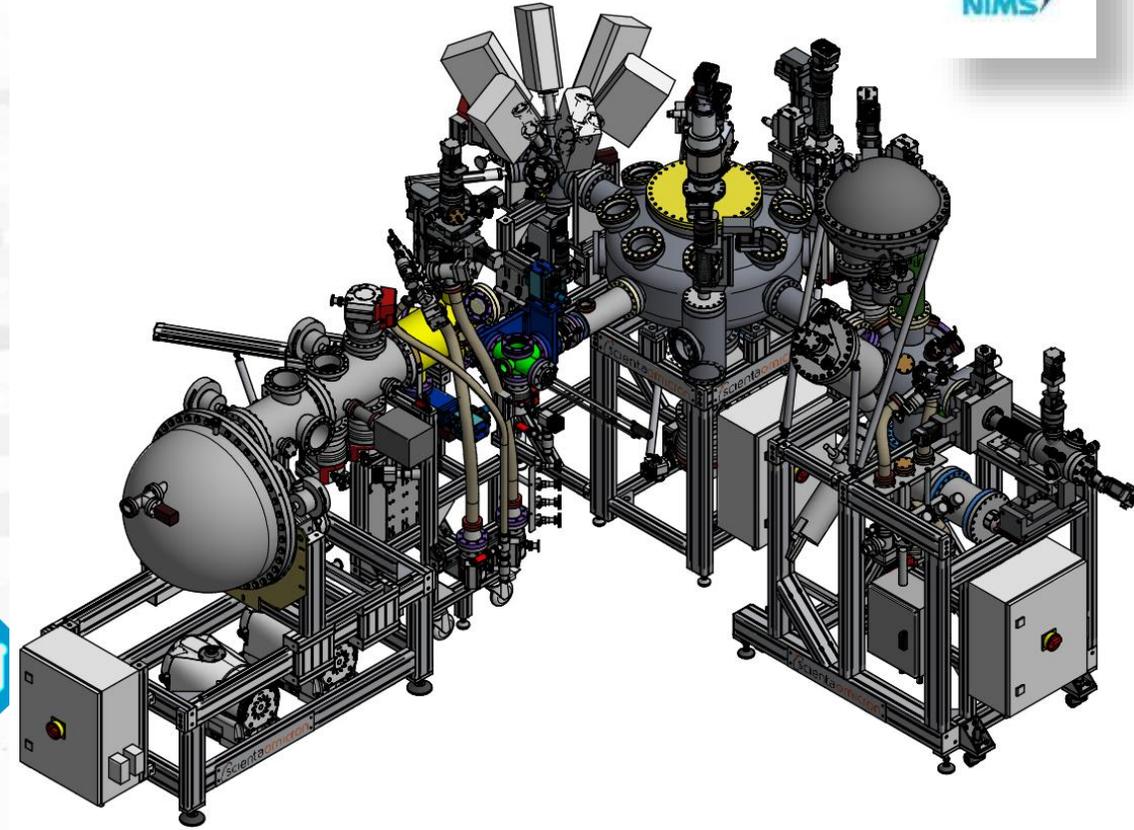
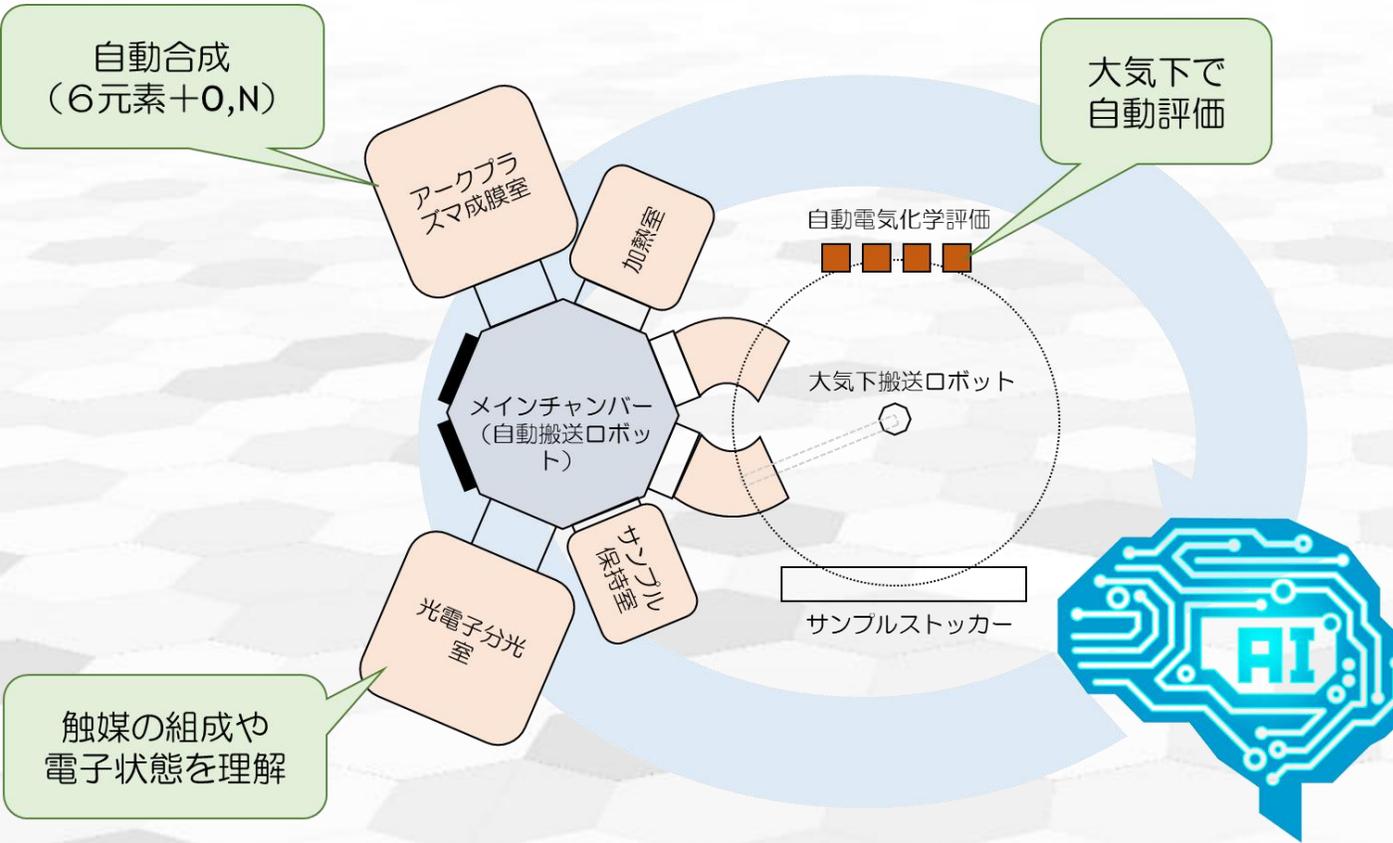
まずまずの予測精度が得られた

提案した分子構造のMAを実験にて確認



提案した新構造に対しても高い予測精度を得た
 → 今後、更に高性能な新構造の発見を目指す

構想図：膨大な数のパラメータ空間を自動探索



① アークプラズマによる白金の堆積

真空システム

② 光電子分光測定による分析

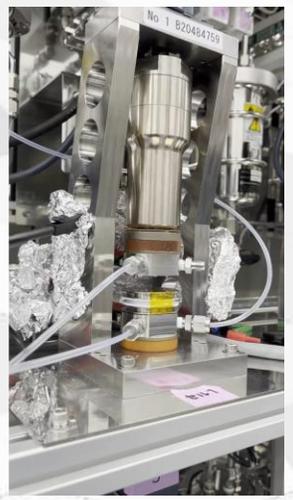
真空システム

生データを記録しながら、高速処理で必要な情報を取り出す

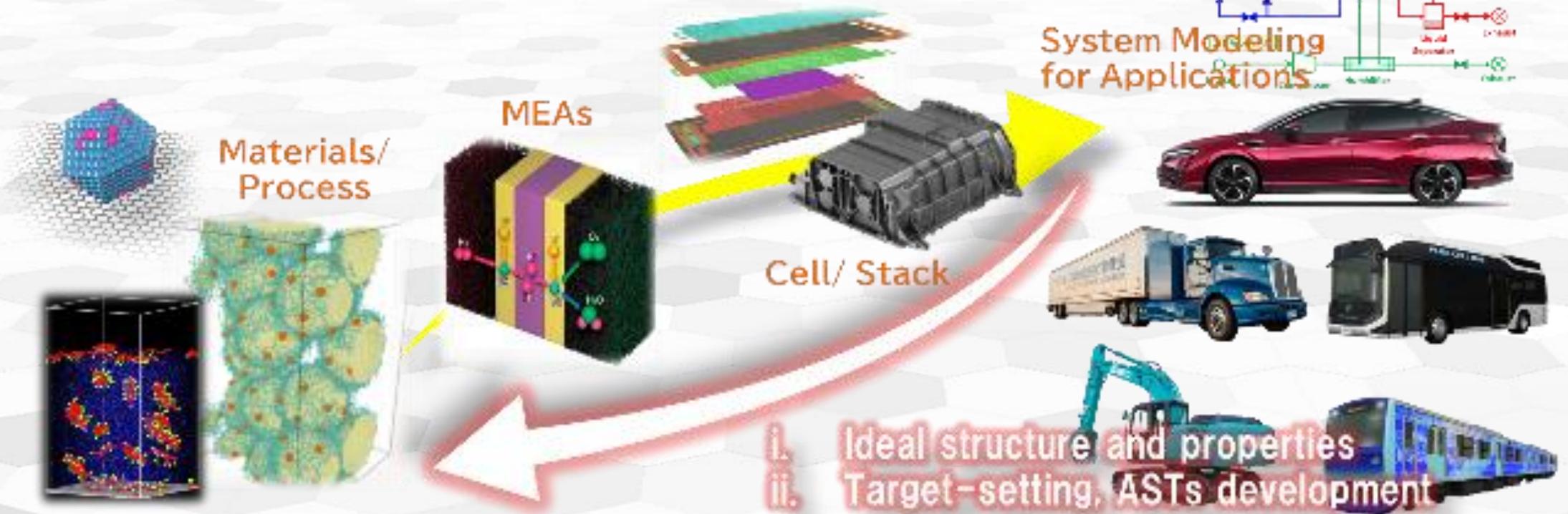
③ 大気下に輸送して評価セルに取り付け

③ 大気下に輸送して評価セルに取り付け

④ セルアッセンブリ



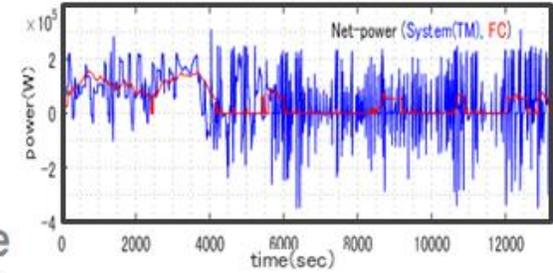
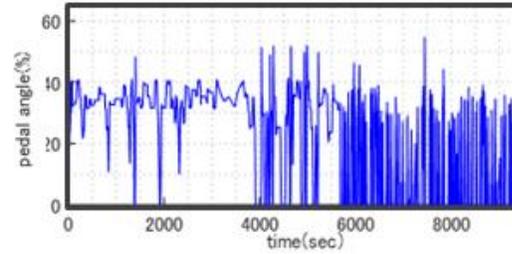
物理モデルによる性能予測



解析による現象解明・モデル検証

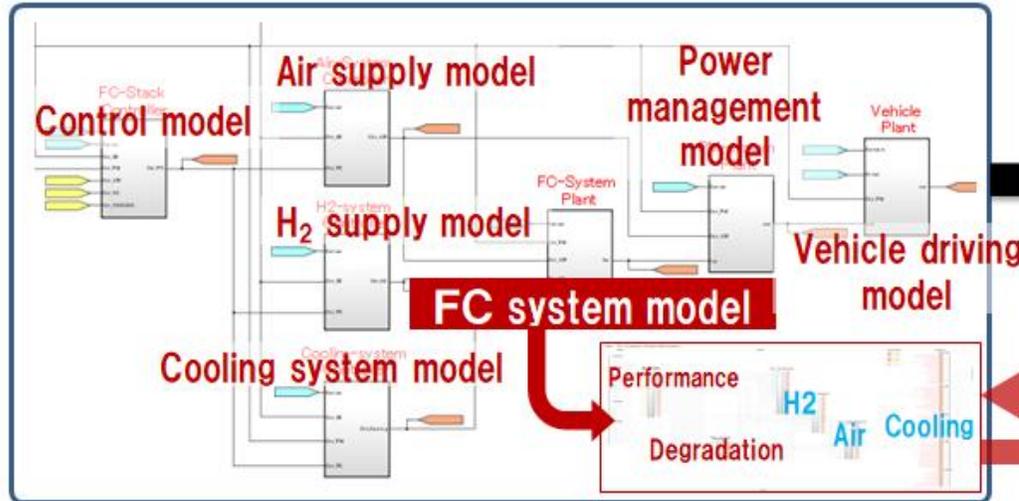
Requirements・Driving conditions

- Accelerator position
- Driving Pattern
- Environment (T [degC], RH [%], P [kPa], ...)



- Stack Power
- Accelerating performance
- Performance degradation

Virtual Vehicle



System・Vehicle performance

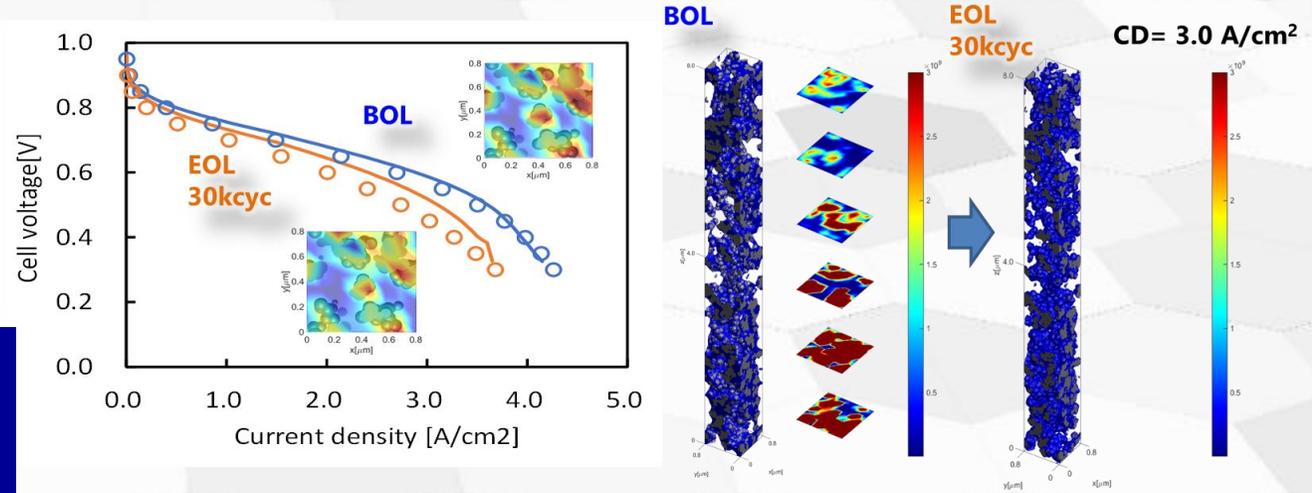


材料物性や運転パターンから車両性能・FC出力、さらにFC材料の劣化状況の予測に活用



FCシステムモデル (部品の劣化)				FCシステム制御器 (部品の劣化抑制)			
ポンプ	バルブ	DC/DCコンバーター		ポンプ	バルブ	DC/DCコンバーター	
FCスタックモデル (セル材料劣化)				FCスタック制御器 (セル材料の劣化抑制)			
触媒 (Pt粒成長)	触媒 (カーボン腐食)	電解質膜 (化学劣化)	電解質膜 (機械劣化)				
FCスタックモデル (セル面内分布)				FCスタック制御器			
物質輸送		反応		触媒 (Pt粒成長)	触媒 (カーボン腐食)	電解質膜 (化学劣化)	電解質膜 (機械劣化)
FCスタックモデル				FCスタック制御器			
物質輸送		反応		出力	燃費	熱バランス	
FCシステムモデル				FCシステム制御器			
エア	水素	冷却	電力	エア	水素	冷却	電力

触媒劣化挙動を高精度・高演算速度で再現するモデルを開発統合 (ver.3)



材料解析Gr→電極層の3D解析データによるバリデーションと構造モデル

FC-DynaMoにセル材料劣化を反映したモデルをリリース
 現在、産業界・アカデミアで積極的に活用中
 ・Matlab版：26件提供 ・アプリ版：146件提供

劣化時の構造変化を反映した計算。発電特性の妥当性を確認



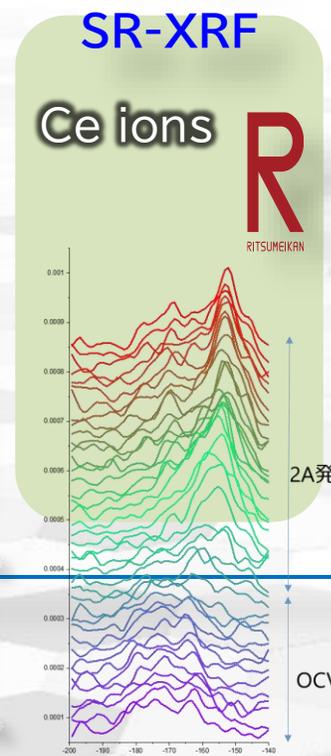
Thru-plane

In-plane

nano-CT
Water

京都大学
KYOTO UNIVERSITY

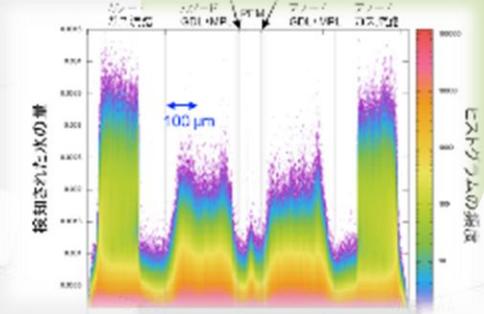
Carbon fiber
Liquid water (GDL)
Liquid water (MPL)
10 μm



micro-CT
Water

NAGOYA UNIVERSITY

水の分布量

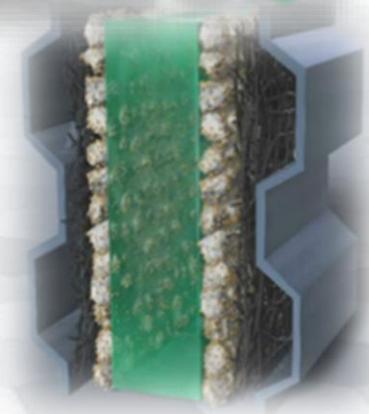


Compton Scattering Imaging
Water/ Ce ions

JASRI

Liquid Water
Carbon Fiber
200 μm

Synchrotron radiation X-ray



Neutron Imaging
Water

Neutron beam

JAEA

Air-IN
H₂-IN
H₂-OUT
Air-OUT
電流値 600A (2.2A/cm²)

Ionomer distributed structure of PtCo/MPC catalyst

FC-Platform

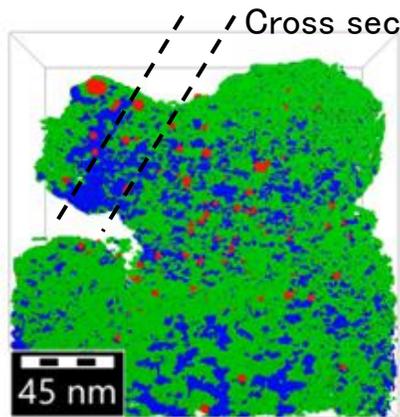
- Surface - Almost the entire carbon surface is covered with ionomer.
 - Inside pore - Ionomer coverage is significantly lower. Uncovered areas also present.
- Ionomer distribution in cross section of PtCo/MPC catalyst

Cross section①

Cross section②

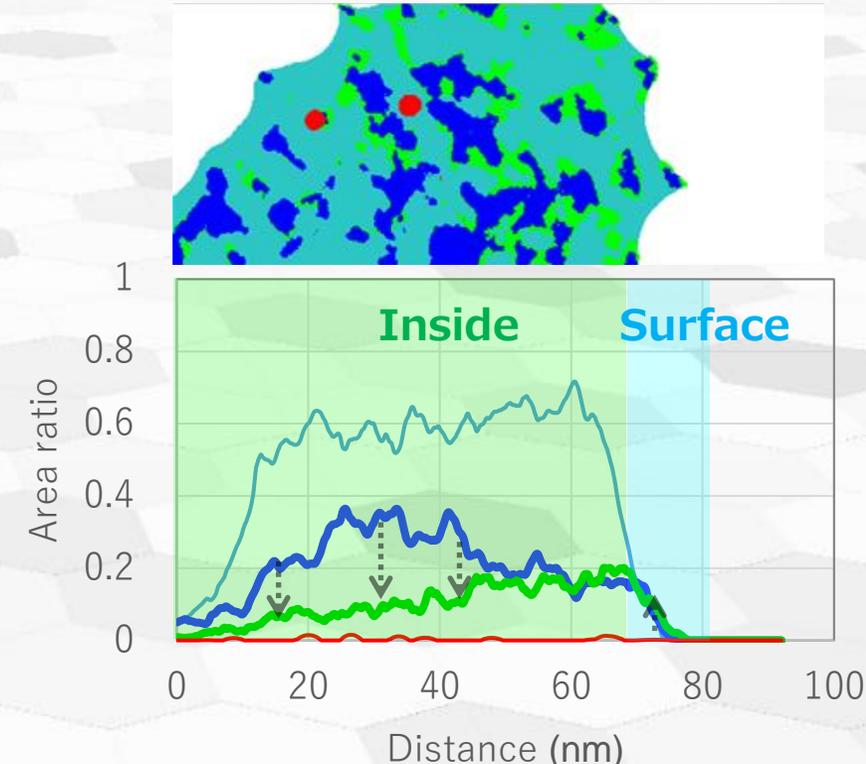
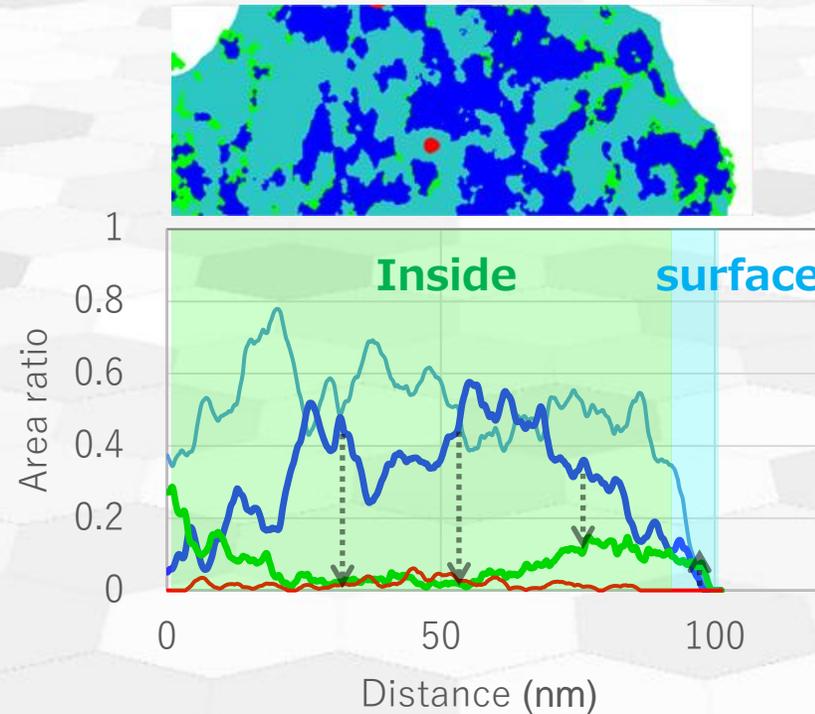
Cross section①

Cross section②



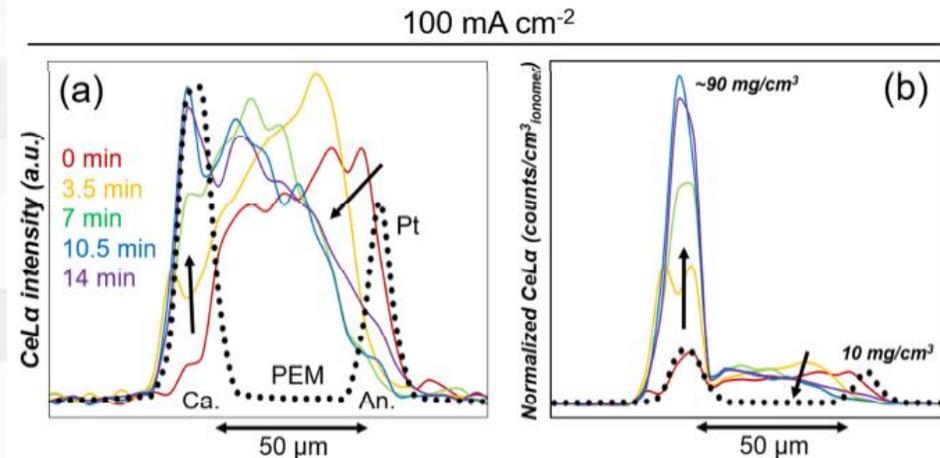
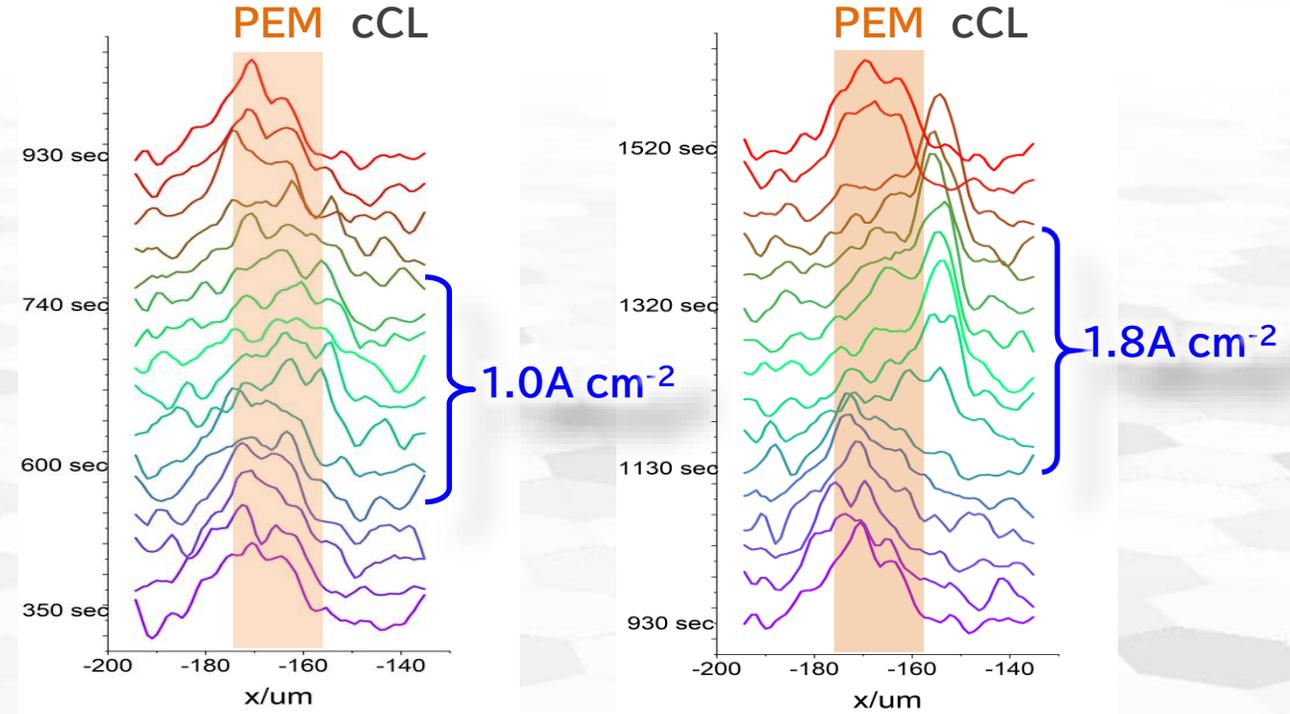
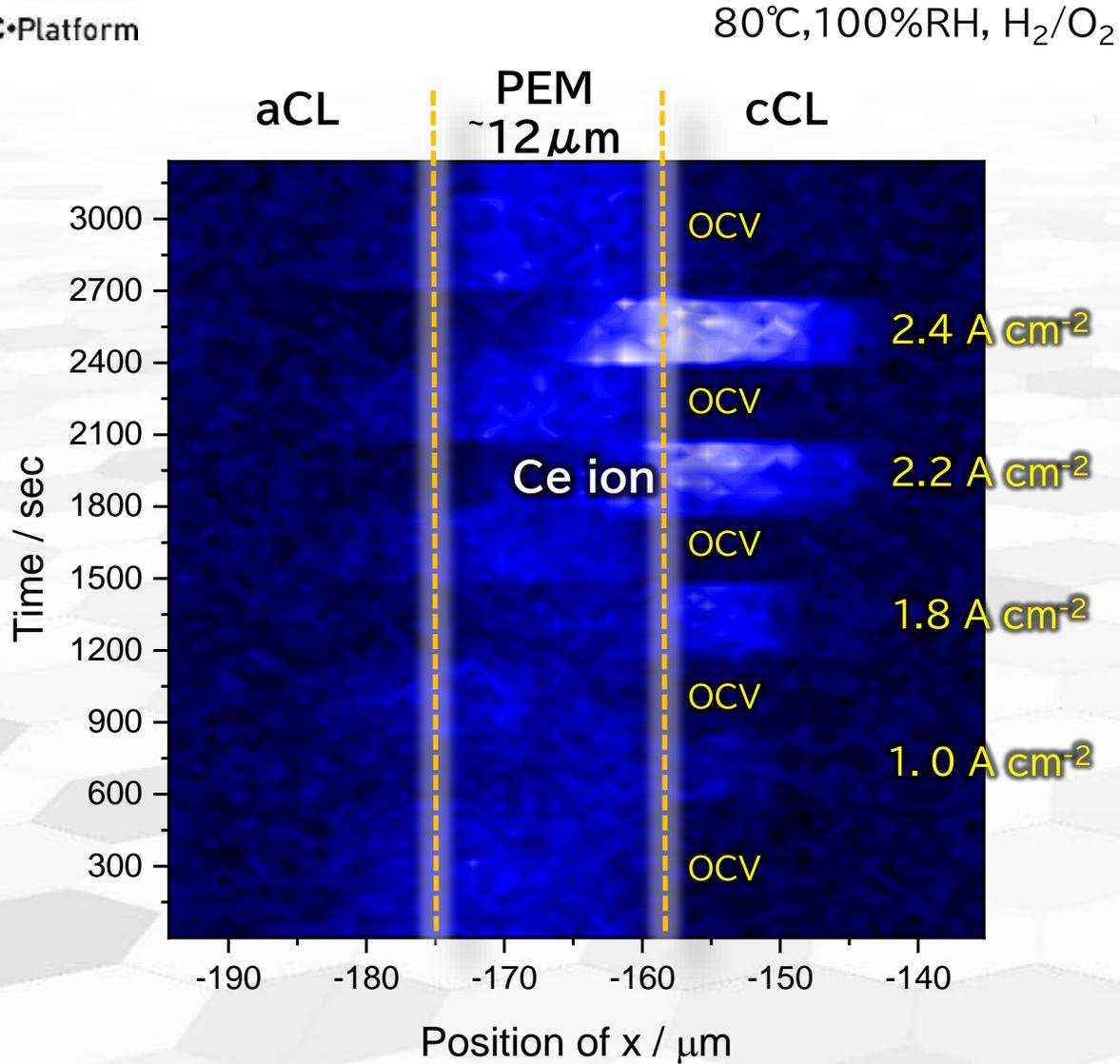
blue : carbon
green : ionomer
red : PtCo particle

Calculate area ratio of each element from cross section



blue : carbon green : ionomer red : PtCo particle cyan : Pores

Operando observation of Ce-ion migration



1. NEDOのFCV・HDV技術ロードマップ

2. PEFCプラットフォーム活動

WP1: データ駆動型なアプローチ

マテリアルズ・インフォマティクス(MI)

WP2: モデル駆動型アプローチ

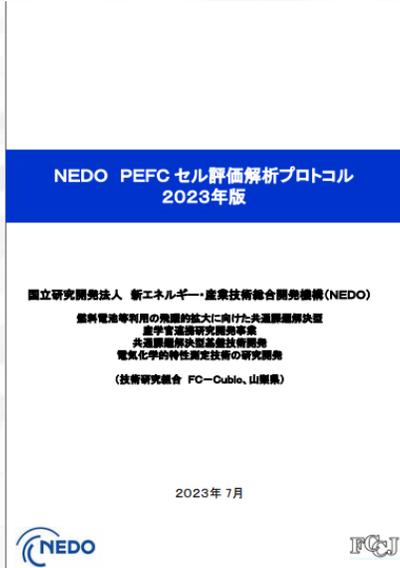
モデリングとシミュレーション

WP3: 評価の標準化

NEDO PEFC evaluation protocol (2023)

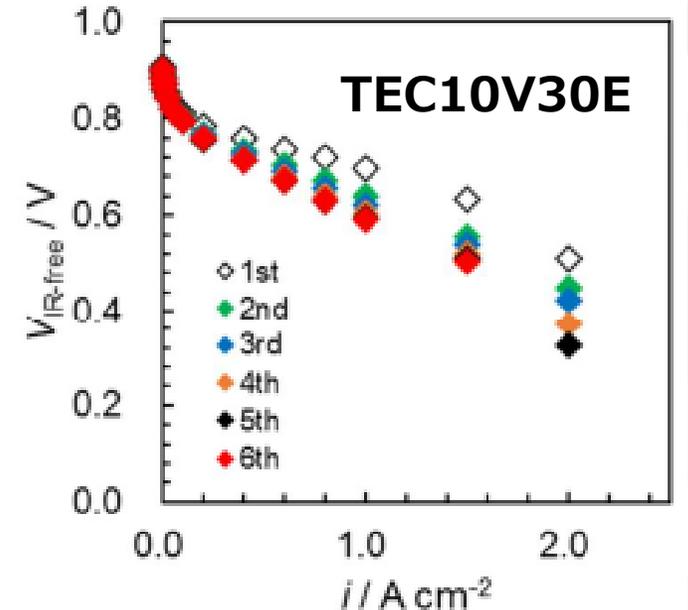
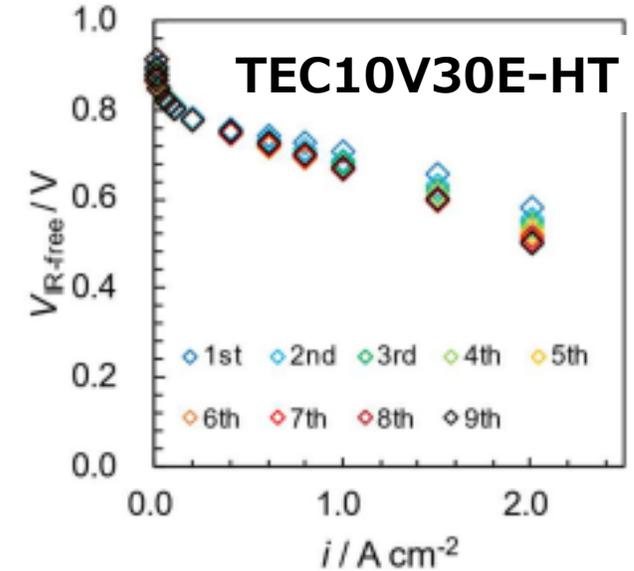
120°C evaluation conditions

Test	Condition
Conditioning	80°C, 80%RH, 101kPa
ECSA measurements	40°C, 100%RH, 101kPa
ECSA measurements Cross over current	80°C, 100%RH, 150kPa
ORR activity	80°C, 100%RH, 150kPa
ECSA measurements Cross over current Proton conductivity in CL	120°C , 100%RH, 300kPa
ORR activity	120°C , 100%RH, 300kPa
I-V measurement	120°C , 100%RH, 301kPa PO ₂ =21kPa



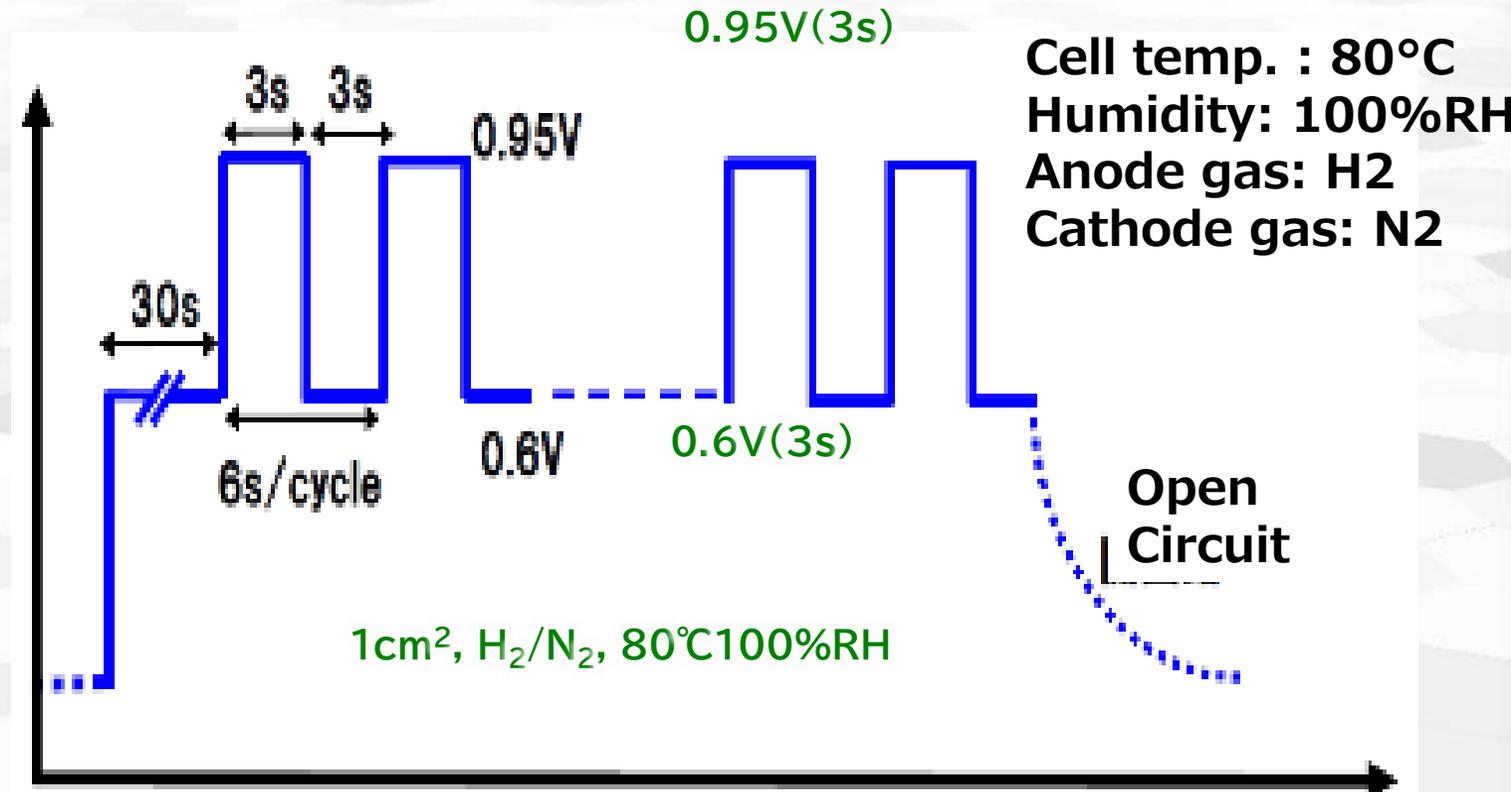
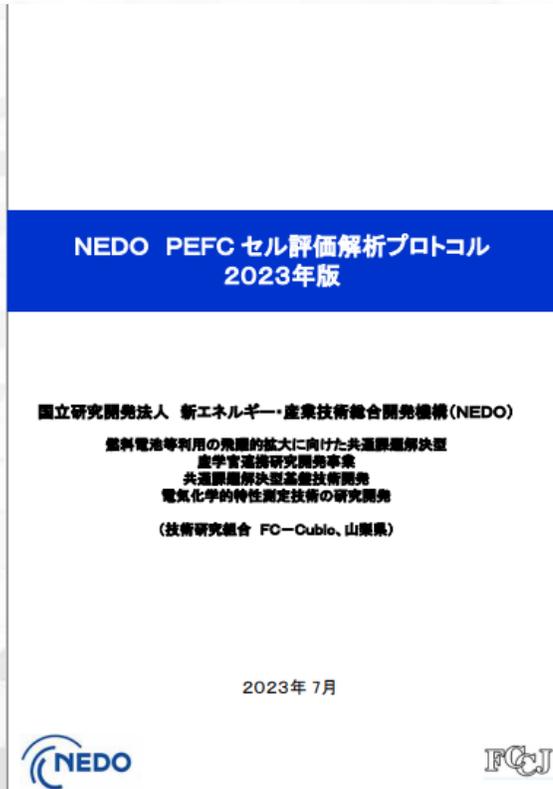
<https://www.nedo.go.jp/content/100963953.pdf>

IV curve at 120°C



NEDO PEFC evaluation protocol (2023)

Potential Cycle test pattern



<https://www.nedo.go.jp/content/100963953.pdf>



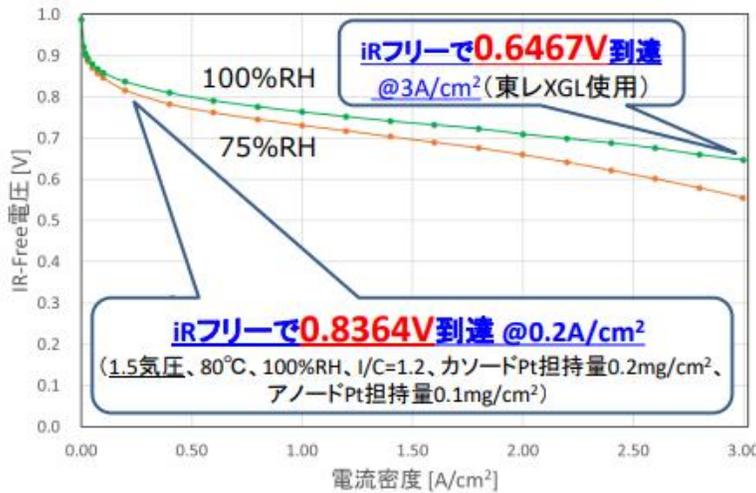
高分子形と酸化物形の技術融合による電極一体型次世代PEFCの創製
九州大学 佐々木先生グループ

[「NEDO水素・燃料電池成果報告会2024」開催報告 | NEDO](#)

セル性能 : 0.8364V@0.2A/cm²に到達 (佐々木ほか)

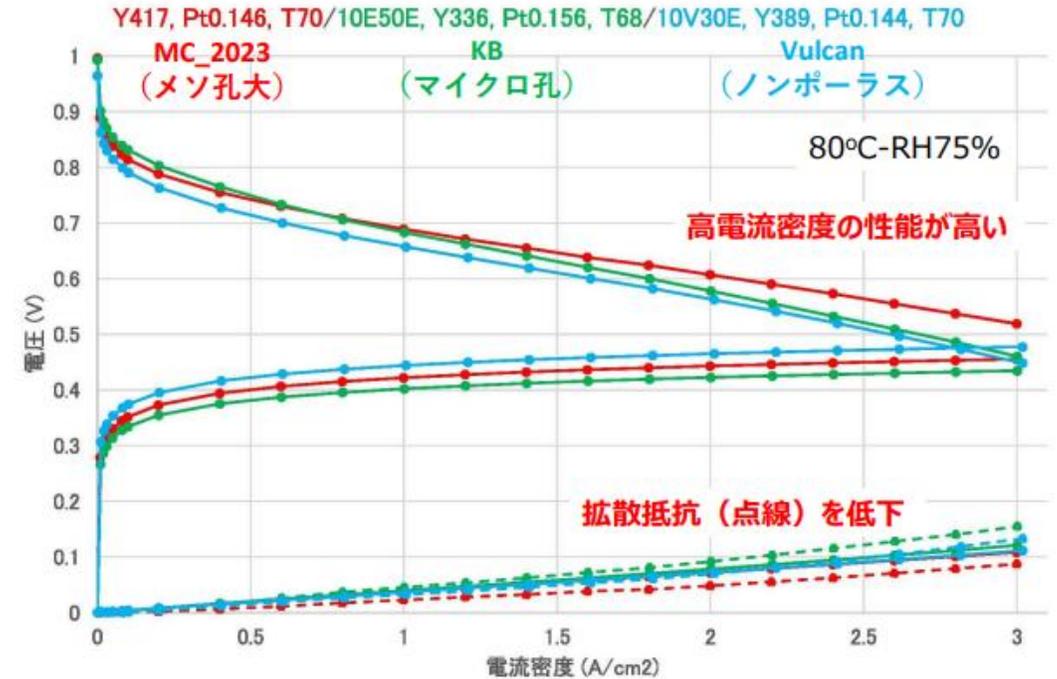
PF機関によるIV評価: MC_2023 (林ほか) @50kPa-G

0.8364V = 中間目標0.84V at 0.2A/cm² ほぼ達成!
0.6467V = 最終目標0.70V at 3A/cm² 達成目前!



アノード側 電極触媒	Pt/C (TEC10E50E)
カソード側 電極触媒	Pt ₇ Ta ₂ Co ₁ /KB
電解質膜	Nafion212
電極面積	1 cm ²
アノード 白金担持量	0.1±0.01 mg/cm ²
カソード 白金担持量	0.2±0.01 mg/cm ²
カソード I/C	1.2
圧力	50kPaG (1.5気圧)

開発中の高活性触媒適用、薄層MPL/GDL適用、アイオノマー分散性向上などで、セル電圧の更なる向上に期待!
(0.84V@0.2A/cm²と0.70V@3A/cm²の目標達成へ)
⇒NEDOシミュレーション研究 (井上教授ほか) と連携して、実験と計算の両輪で比較



メソ細孔は、低電流では小さく、高電流では大きい方が良い可能性を示唆

<https://www.nedo.go.jp/content/100980725.pdf>

燃料電池評価・材料解析・シミュレーション技術・MI技術を通じて
NEDO 革新FC事業の材料研究Gの材料の研究開発に貢献

第16回FC-Cubicオープンシンポジウム開催案内 (3/7)

■ 講演会場：日本ジョナサンチョイ文化館



■ FCV展示会：九州大学水素ステーション

MIRAI-1



MIRAI-2



クラウンFCEV

CLARTY FUEL CELL



CR-V e:FCEV



FC小型トラック



FC大型トラック



第16回FC-Cubicオープンシンポジウムは、
2025年3月7日(金)九州大学伊都キャンパス
日本ジョナサンチョイ文化館にて開催
またFCEV展示会では、
九州大学所有のMIRAI-1&2、クラウンFCEV、
CLARTY FUEL CELLに加えて
CR-V e:FCEV、小型&大型FCトラックを展示予定



**NEDO FC-Platform project is commissioned by
the New Energy and Industrial Technology Development Organization (NEDO).
We are deeply grateful to everyone involved.**

ご清聴ありがとうございました



FC-Platform