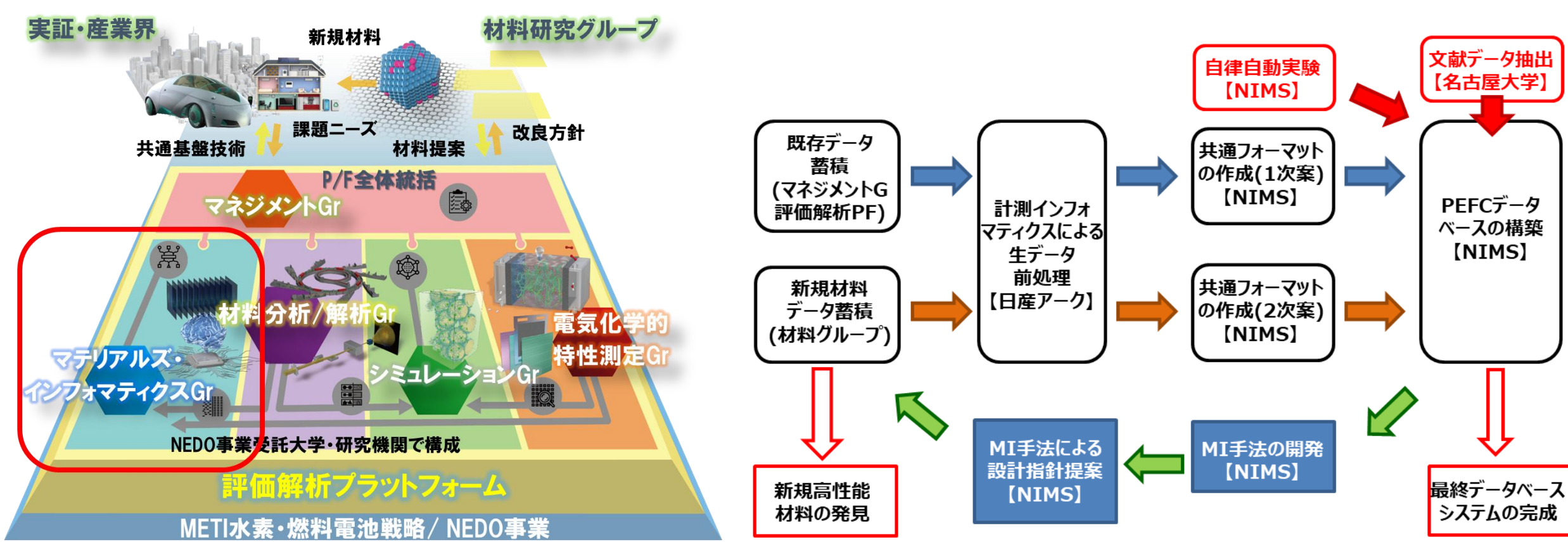


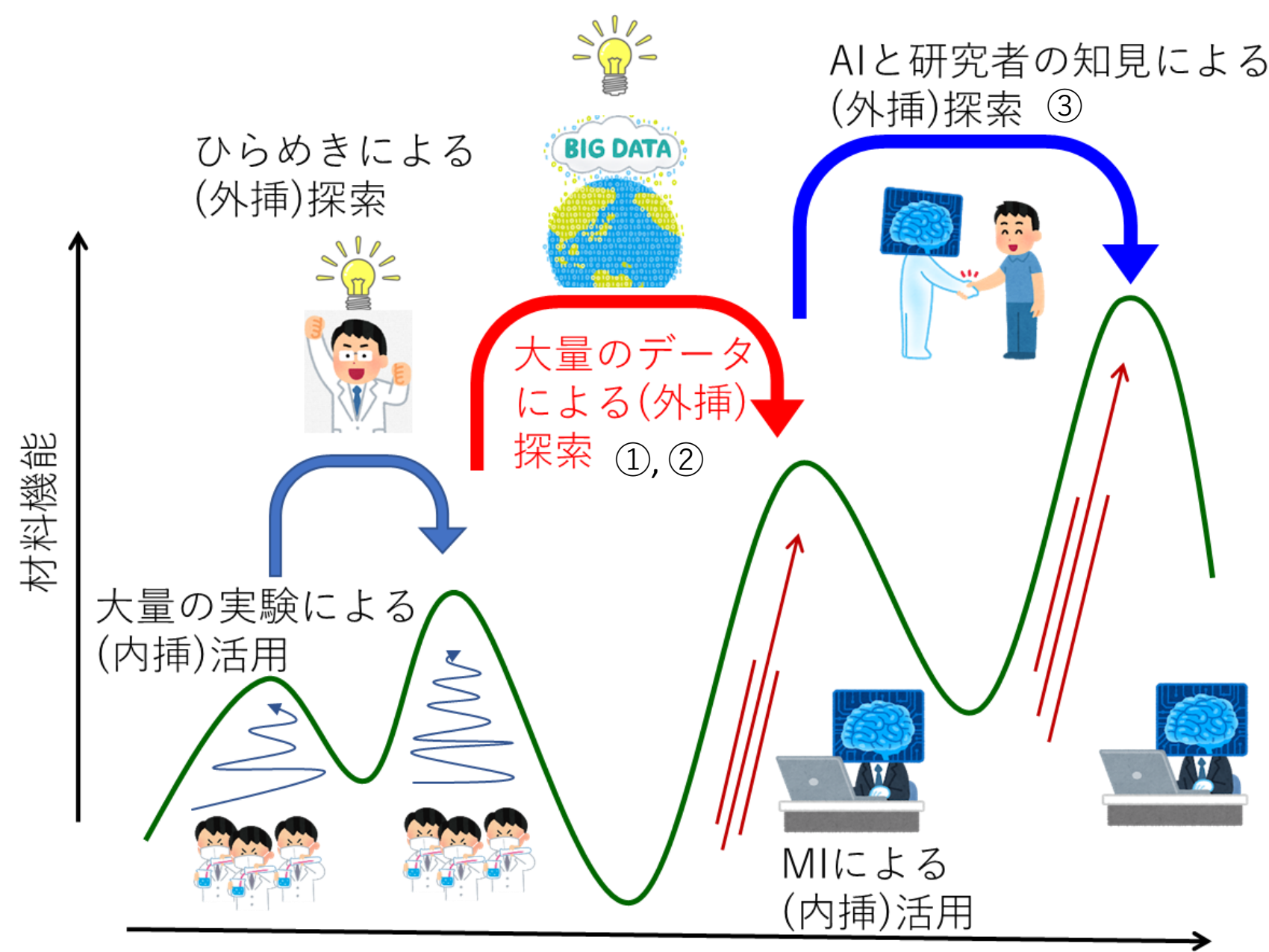
事業概要

1. 期間
開始：2020年8月
終了（予定）：2025年3月
2. 最終目標
NEDO燃料電池ロードマップにおける2030年以降に目指すべき目標達成に向けて、革新的な新規材料開発のための指針提案を行うことを目的とする。
そのために以下を実施する。
・これまでに得られている知見を集約し、新規データを蓄積する。
・データ蓄積のために、自動自律探索実験を実施する。
・上記DBとMI解析を用いた指針提案法のノウハウを蓄積する。
3. 成果・進捗概要
・新規データ蓄積のためのデータベースと、それを利用するためのプラットフォームを構築、機能追加した。
・自動自律探索実験の装置を導入し、データ創出を実施している。
・上記DBとMI解析を用いた指針提案を、材料研究グループと共同で実施し、成果を得た。

1. 事業の位置付け・必要性



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



- ①PEFCデータベース
- ②自律自動実験データ
- ③PEFCに関するMI解析ノウハウと解析手法開発
⇒新規材料の設計指針提案

2. 研究開発成果について

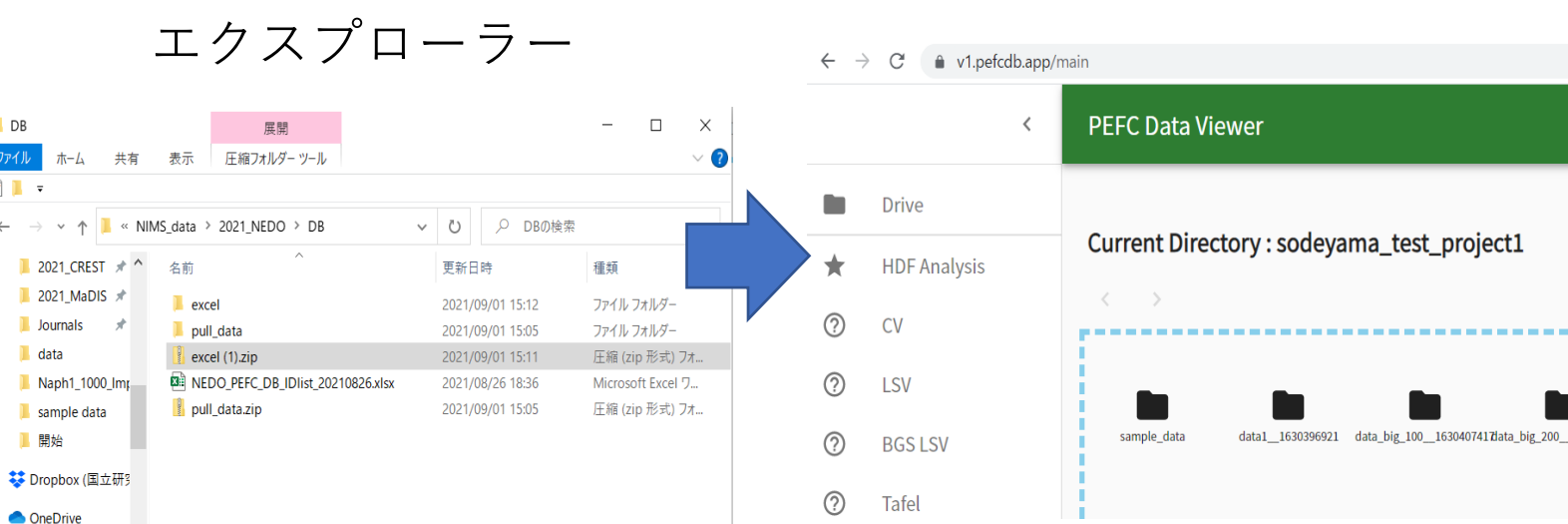
MIX Platformによるデータ蓄積と活用

ウェブブラウザ（Chrome推奨）でURLにアクセス

→データをアップロードする画面が表示

アップロード後、以下の機能が利用可能。

■ウェブブラウザによるデータ蓄積



■利用者・データ件数の拡大

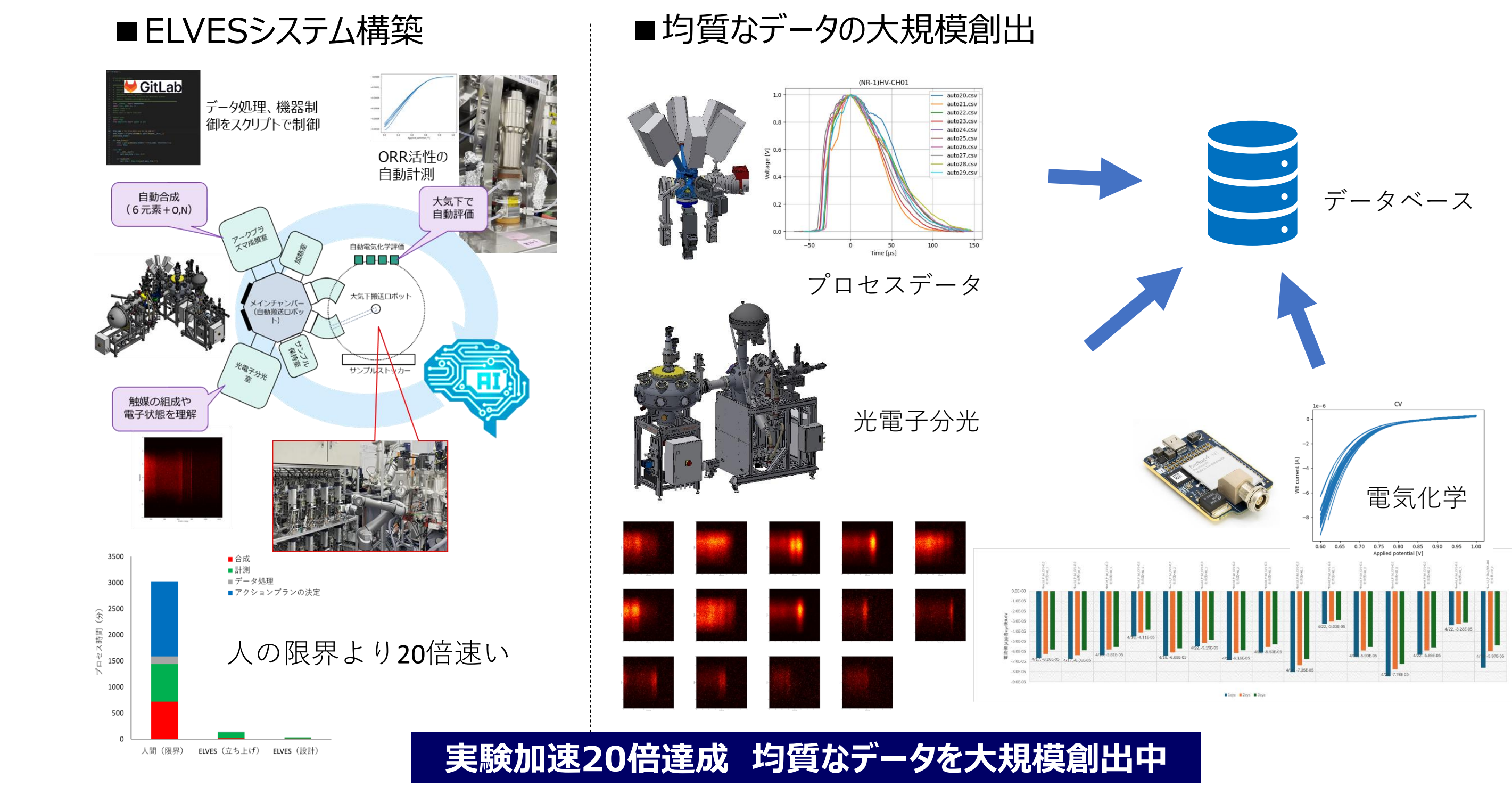
ユーザー数：131
データ数：29,000件
電気化学グループや解析グループのデータがメイン



■FC-Cubic電気化学Grとの磨き上げ

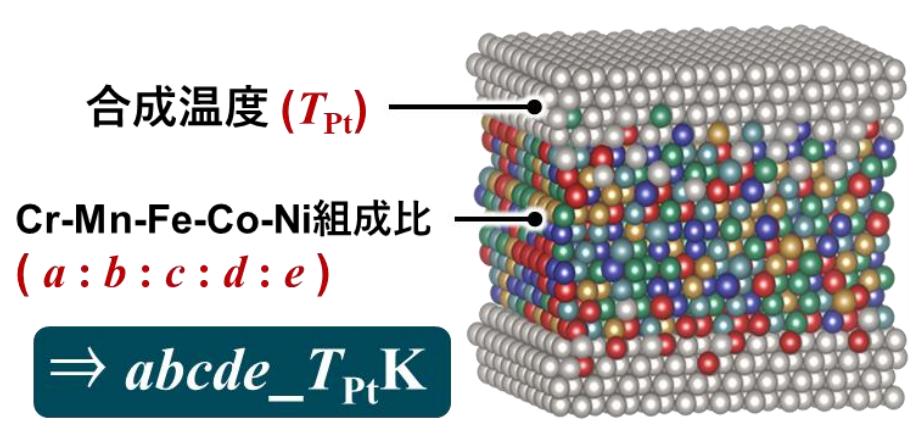


自動自律実験によるデータ創出

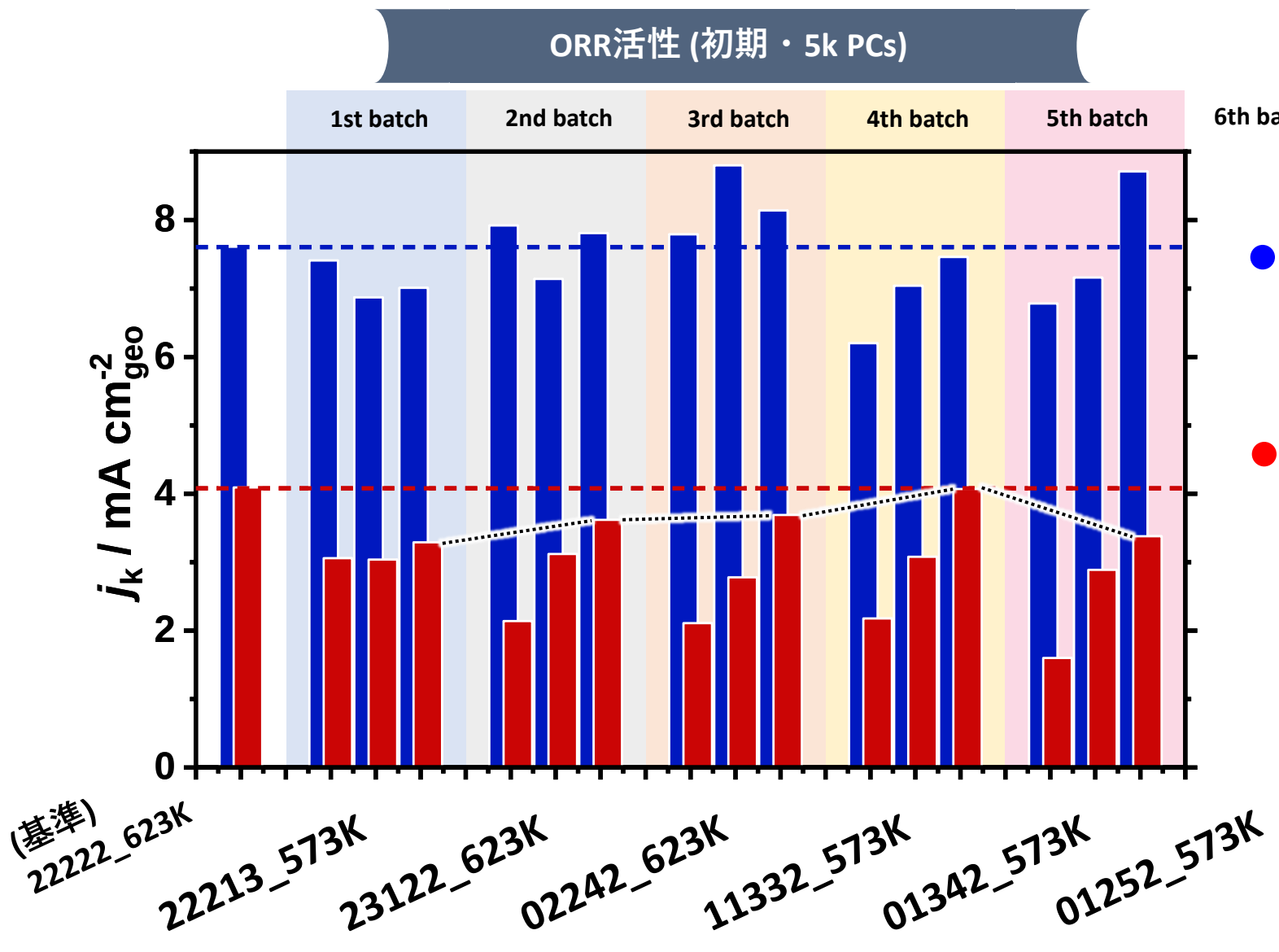


MI解析事例 Pt-HEA(111)モデル触媒の合成条件検討（東北大学）

・ハイレントロピーアロイ触媒の組成と実験条件をアクティブラーニングにより最適化。

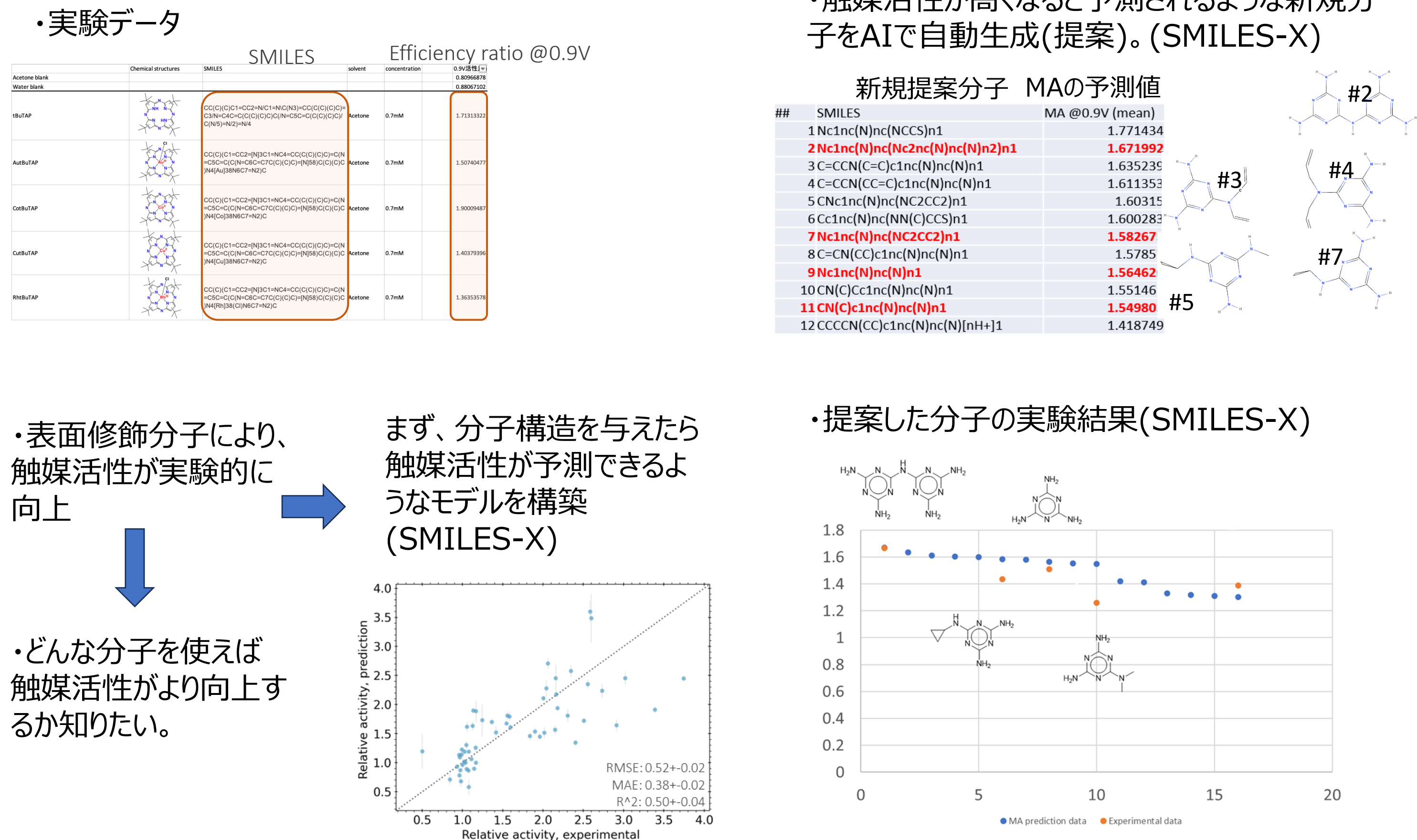


Y. Chida, et al., ACS Applied Materials & Interfaces, 17, 22557 (2025).



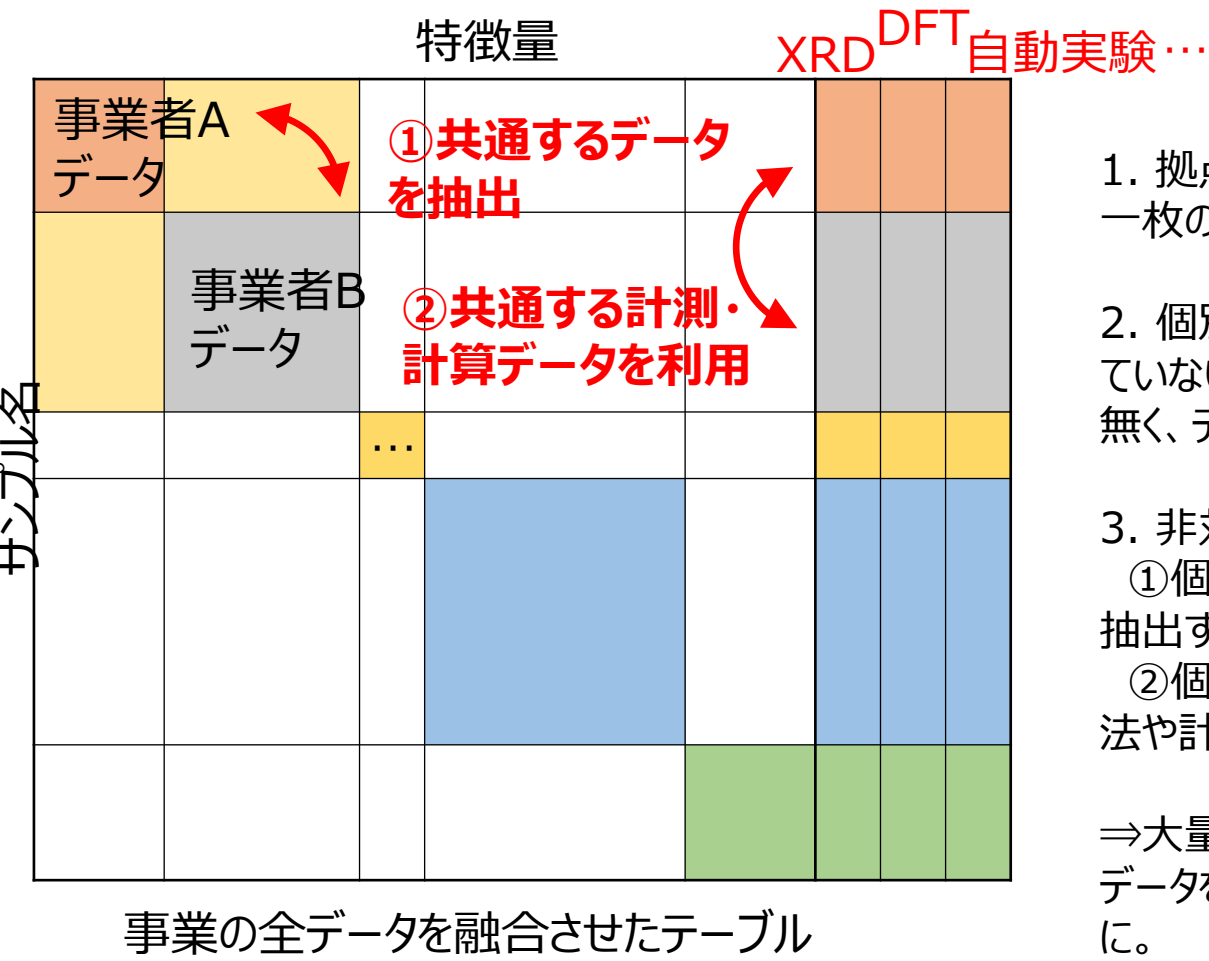
非等組成比5元系、4元系の合金化元素でも高ORR特性を示す合成条件を発見

MI解析事例 表面修飾分子MI解析（AIST）



3. 今後の見通しについて

異なる研究者、分野のデータ連携
⇒合体した大きな表を作成してデータ連携



1. 拠点内の全てのデータを融合させ、一枚のテーブルを作る。
2. 個別データ間で共通性を考慮していないため、非対角成分にデータが無く、データ解析ができない。
3. 非対角成分にデータを与えるため、①個別データ間で共通するデータを抽出する。(データの共通リスト化) ②個別データ間で共通する計測手法や計算データを利用する。
- ⇒大量に蓄積される、異なる性質のデータを利用した解析の実施が可能に。

- ・ **実用化・事業化のイメージ（成果がどのように使われるか）**
本事業で構築したPEFC データベースを用い、本事業で得たMI解析のノウハウを利用することで事業者が独自にMI解析を行い、新材料探索の指針を得ることができる。
- ・ **実用化・事業化に対する今後の課題と対応方針**
作成したデータベースを事業終了後にどのように扱うかを決める必要がある。基本的にはNEDOによる許可のもと、可能なデータは国内で公開する。
- ・ **実用化・事業化に向けた具体的な取り組み（計画や戦略等）**
作成したデータベースおよびMI解析プラットフォームをより利用しやすく改修することを計画している。
- ・ **その他、顕著な経済・技術・社会的な効果、人材育成の取り組み等**
基本的なMI解析手法が自由に利用できるようプラットフォームになっているため、これを用いたMI解析の実習が可能であり、研究者のスキルアップに貢献できる。