

革新的 GX 技術創出事業(GteX)  
研究開発計画書  
＜領域:水素＞

令和5年5月



未来創造研究開発推進部

## 目次

### 1. 背景・目的

- ・GX 推進における各領域の重要性と現状の課題等
- ・既存事業や他プロジェクトとの関係

### 2. 目標

- ・各領域で達成したい目標
- ・目標設定の考え方、達成困難性

### 3. 期待する波及効果

- ・目標達成後に期待する効果
- ・CO<sub>2</sub>削減効果、経済波及効果等の社会・経済インパクト

### 4. 研究開発テーマ

- ・研究開発目標の達成に向けた各研究開発テーマ名および研究開発内容
- ・各テーマの達成目標およびマイルストーン、ステージゲート設定
- ・想定される研究開発体制
- ・予算

### 5. 研究開発マネジメント

- ・評価の進め方
- ・データ活用(DX)や大型放射光施設等との連携
- ・人材育成、国際連携
- ・知財の取り扱い
- ・社会実装に向けた取り組み・計画等

## 1. 背景・目的

本領域では、2050年カーボンニュートラルを目指す上で必要不可欠な水素について、再生可能エネルギー由来の電力を用いた水電解による製造、貯蔵から利用に関わる先進的技術の開発により、水素社会の実現に貢献する。アカデミア等のシーズを活かして、現状のボトルネック課題を革新的に打破するための技術開発や、新概念の創出、およびこれら技術の実用化に向けた研究開発を対象とし、要素技術の基礎研究に留まらず、材料の評価とスケール化の見通しまでを一気通貫で行い統合的な研究開発を推進する。また、広い視野を持ち展開力のある人材を育成・輩出していくことも目的とする。

本研究開発計画書は、文部科学省が策定した基本方針、研究開発方針<sup>1</sup>に基づき、JSTが策定する。

### ・GX推進における各領域の重要性と現状の課題等

- 水素は、燃料として用いた場合に二酸化炭素を排出しないクリーンなエネルギーであり、再生可能エネルギーなどをはじめとする様々な資源から製造できることから、2050年カーボンニュートラルを目指す上で必要不可欠な二次エネルギーである。
- 「2050年カーボンニュートラルに伴うグリーン成長戦略」<sup>2</sup>や、「GX実現に向けた基本方針」<sup>3</sup>において、水素・アンモニアはカーボンニュートラルの実現に向けた突破口となるエネルギーの1つと挙げられており、カーボンニュートラルと将来の経済成長の実現へ貢献する重点分野の1つとして位置づけられている。
- さらに、昨今の国際情勢を受けて、国際的にもエネルギー安全保障の強化が加速している。したがって、水素を最大限活用する水素社会の実現は、エネルギー安全保障の確保、気候変動への対応、新たな市場創出・産業競争力の強化の観点からも極めて重要である。
  
- 我が国では、2009年に固体高分子形燃料電池ベースの家庭用燃料電池が世界で初めて商品化され、2014年には燃料電池自動車（FCV）も世界に先がけて販売された。水電解技術においても、2020年2月に稼働を開始した、「福島水素エ

---

<sup>1</sup> 「革新的GX技術創出事業（GteX）」基本方針及び研究開発方針（令和5年4月）（[https://www.mext.go.jp/a\\_menu/kaihatu/kankyouene/detail/1417737\\_00001.htm](https://www.mext.go.jp/a_menu/kaihatu/kankyouene/detail/1417737_00001.htm)）

<sup>2</sup> 「2050年カーボンニュートラルに伴うグリーン成長戦略」（令和3年6月18日）（[https://www.meti.go.jp/policy/energy\\_environment/global\\_warming/ggs/pdf/green\\_honbun.pdf](https://www.meti.go.jp/policy/energy_environment/global_warming/ggs/pdf/green_honbun.pdf)）

<sup>3</sup> 「GX実現に向けた基本方針」（令和5年2月）（[https://www.meti.go.jp/press/2022/02/20230210002/20230210002\\_1.pdf](https://www.meti.go.jp/press/2022/02/20230210002/20230210002_1.pdf)）

エネルギー研究フィールド(FH2R)』は、グリーン水素製造プラントとしては当時世界最大級の 10 MW システムを実現するなど、水素関連技術において世界を牽引してきた。

- 一方、米国では DOE が中心となって技術開発をリードしてきた。欧州でもグリーンディール投資や政策により、水素社会戦略を押し進めている。中国では補助金政策を活発化しており、グリーン水素技術においては世界的に技術開発が加速されている。
- このように拡大が見込まれる世界市場の獲得のためには、技術力の強化や国内外の市場形成に資する取り組みの強化が必要であり、アカデミアを中心とした基盤技術の先進化により日本の競争力を維持することが不可欠である。

#### ・既存事業や他プロジェクトとの関係

- GI 基金「再エネ等由来の電力を活用した水電解による水素製造」(NEDO)<sup>4</sup>
  - ◇ 水電解装置の設備コスト削減と性能評価基盤の整備に資する研究開発を推進している。水電解では、2030 年までにアルカリ形水電解装置の設備コスト 5.2 万円/kW、固体高分子形水電解装置の設備コスト 6.5 万円/kW を見通せる技術の実現を目標に掲げ、水電解装置の大型化・モジュール化技術開発、優れた新部材の装置への実装技術開発、熱需要や産業プロセス等の脱炭素化実証を進めている。
  - ◇ また、性能評価基盤整備では、2025 年までに水電解装置の性能評価基盤を整備することを目標に、日本企業の海外市場への新規参入を促進するために、海外機関等との連携も含め、海外の運転条件にも対応した統一的な性能評価基盤整備を進めている。
- 「水素利用等先導研究開発事業」(NEDO)<sup>5</sup>
  - ◇ 2040 年以降という長期的視点を睨み、水素等の「カーボンフリーなエネルギーの新たな選択肢」としての地位を確立させることを目指し、再生可能エネルギーからの高効率低コスト水素製造技術、水素の長距離輸送、長時間貯蔵を容易にするためのエネルギーキャリア技術及び大規模水素利用技術の先導的な研究開発に取り組んでいる。
- 「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」(NEDO)<sup>6</sup>

---

<sup>4</sup> グリーンイノベーション基金事業「再エネ等由来の電力を活用した水電解による水素製造」プロジェクトに関する研究開発・社会実装計画 (<https://www.nedo.go.jp/content/100932387.pdf>)

<sup>5</sup> 「水素利用等先導研究開発事業」HP ([https://www.nedo.go.jp/activities/ZZJP\\_100068.html](https://www.nedo.go.jp/activities/ZZJP_100068.html))

<sup>6</sup> 「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」基本計画 (<https://www.nedo.go.jp/content/100920018.pdf>)

- ◇ 燃料電池の自律的な普及拡大に向けて更なる高性能化、高耐久化、低コスト化に資する要素技術を開発し、産業界へ橋渡しすること、これまで実用化されてきた自動車や定置用以外の様々な用途への燃料電池の展開につながる技術を確認することを目的としている。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、そ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開発、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水電解などの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、燃料電池システムおよび水電解システムのコスト低減を実現するための革新的な生産技術や周辺機器、これらを含めたシステム化技術等の研究開発を進めている。
- データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト事業「再生可能エネルギー最大導入に向けた電気化学材料研究拠点」(文部科学省)<sup>7</sup>
  - ◇ 材料創製・計測・理論・データの有機的連携とMDX・大型先端設備・スパコンを戦略的に活用する拠点を構築し、マテリアル研究・DXユースケースを実践している。特に蓄電池・水電解等の超大容量、低コスト化に資する研究にデータサイエンス的手法を取り入れたデータ駆動型の先進的な研究手法を開発し、これらの革新的材料の効率的創出を目指しており、DXツールの活用等において、本事業との連携が期待される。

本領域では、実用化を見据えながら当該分野の基礎研究から応用研究(TRL1~3相当<sup>8</sup>)を実施し、企業への技術移転等の他、NEDOプロジェクト等への橋渡しも検討しつつ、2050年カーボンニュートラル実現に向けた社会実装を加速する。

## 2. 目標

・各領域で達成したい目標

- 2050年カーボンニュートラルを目指す上で必要不可欠な水素について、再生可能エネルギーを用いた水電解によるグリーン水素製造、貯蔵から利用に関わる先進的技術の開発により、水素社会の実現に貢献する。水素の安定供給と需要拡大を目指し、高効率化、高耐久化、低コスト化など、社会から求められる性能を兼ね備える水電解・燃料電池・水素貯蔵システムを、データ連携や自動・自律

<sup>7</sup> 「第7回 マテリアル戦略有識者会議」資料(令和4年2月)(<https://www8.cao.go.jp/cstp/material/7kai/siryoy2-5a.pdf>)、DX-GEM再生可能エネルギー最大導入に向けた電気化学材料研究拠点HP(<https://webpark2339.sakura.ne.jp/wp/about-us/>)

<sup>8</sup> Technology Readiness Level: IEA(International Energy Agency)の基準に準拠

実験等を活用して実現する。

- 基礎的な材料開発から評価・解析までを一貫して行うチーム型研究開発の中で、電気化学・触媒化学のみでなく、幅広い分野の人材を巻き込みつつ、次世代を担う研究人材を育成することにより、水素関連業界に高度人材を輩出する。

#### ・目標設定の考え方、達成困難性

- 水素社会の実現に向けた水素の一般普及にあたっては、水素を化石燃料と同等レベルまで安く、そして大量にかつ安定的に供給して、需要を拡大させることが不可欠である。そのため、日本全体において、水素を「つくる(水素製造)」「ためる・はこぶ(貯蔵・運搬)」「つかう(燃料電池等)」取組を同時並行で推進することが必要である。これまで、産業界を中心にこれら水素関連の技術開発が進められてきており、水電解システムの大型化や燃料電池の商用化などが達成されている。しかし、2023年2月にNEDOより公開された「燃料電池・水素技術開発ロードマップ」<sup>9</sup>に記載されているとおり、世界各国において技術開発や事業展開が加速度的に進展し、競争が激化している一方、企業における開発コストの課題もあり<sup>10</sup>、今後の国際競争力の強化と2050年カーボンニュートラル達成に向けた水素社会の実現のためには、既存技術の展開・普及のみならず、アカデミアによってDXも含めた複数の専門分野を融合しながら、非連続な革新的イノベーションを可能にする長期的視点に基づく新規技術の実現・普及が強く求められている。
- 「つくる(水素製造)」については、GI基金において、水電解装置の大型化、水素サプライチェーンの構築が取り組まれており、水素供給網も検討されている。一方、水電解においては耐久性やコスト面等の課題も残されており、中長期的には貴金属等のレアメタル資源量の枯渇なども予想され、環境負荷低減の課題も想定される。社会実装を推進していくためには、既存システムの性能・耐久性を凌駕する革新的な材料・システム開発および要素解析技術が必須であり、アカデミアの貢献が求められる。
- 「ためる・はこぶ(貯蔵・運搬)」に関しては、高圧水素貯蔵や液体水素貯蔵においてNEDO等で研究開発が進む一方で、特に大型トラックや建機、船舶、鉄道といった重負荷移動体(HDV:Heavy Duty Vehicle)搭載用途などにおいて、従来技術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が求められている。実装に向けては液体アンモニアと同等レベルの水素貯蔵密度を実現するための新規材料・原理等の探索や開発・スケール化がボトルネック課題である。

---

<sup>9</sup> 「NEDO 燃料電池・水素技術開発ロードマップ」(令和5年2月9日)([https://www.nedo.go.jp/library/battery\\_hydrogen.html](https://www.nedo.go.jp/library/battery_hydrogen.html))

<sup>10</sup> 「革新的GX技術開発小委員会(第1回)配布資料」(令和4年12月20日)([https://www.mext.go.jp/content/20221221-mxt\\_kankyoku-000026678\\_3.pdf](https://www.mext.go.jp/content/20221221-mxt_kankyoku-000026678_3.pdf))

- 「つかう(燃料電池等)」については、水素発電や水素還元製鉄等の技術開発は NEDO で取り組まれている一方で、HDV の FC 化には性能と耐久性の飛躍的向上などハードルの高い課題が多く残されている。
- 以上のように、「つくる(水素製造)」「ためる・はこぶ(貯蔵・運搬)」「つかう(燃料電池等)」分野で更なる大規模な商用化を促進させるためには、多くの技術課題が想定されており、これらの分野において、科研費等による個々のシーズ探索による要素技術を活用して、その先にある応用研究に向けて取り組むことが求められている。すなわち、現状のボトルネック課題を踏まえてそれを革新的に打破するための技術開発や、新概念の創出、およびそれら技術を組み合わせる実用化・スケール化に向けた研究開発を行うことが必要である。
- さらに、社会実装を見据えた上では、高効率・高耐久・低コストの 3 点が満たされるシステムであることが求められる。例えば、効率が向上しても、材料コストが高かったり、その効率を維持したりできなければ、使用者が受ける便益は小さくなり、低コスト・安定的な水素供給や需要増につながらない。すなわち、実用化フェーズに向けては、効率、耐久性、コスト面のいずれかではなく、全てにおいて必要条件を満たしつつ、スケール化までを見通した技術開発が必要不可欠である。加えて、直近の技術開発を加速するためには、測定・解析データの効率的蓄積や利活用(DX)等を推進して開発力を強化していくことが必要である。これらのアカデミア等による新規概念も含めた研究開発を、産業界における取組と並行して推進することにより、既存技術の延長線を超える革新を起こして、「燃料電池・水素技術開発ロードマップ」における数値目標も達成可能になると期待される。
- 加えて、我が国における研究人材の不足が深刻化しており、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、若手の研究人材を増やすとともに、継続的に研究に取り組みながら持続的に将来の産業を支える人材育成が求められている<sup>11</sup>。更に、各分野においてトータルとしての性能向上にあたっては、個別の専門分野に留まらず、それらを組み合わせ、複数の専門分野を融合しながら研究開発を推進することが必要であり、既存の研究者ネットワークに留まらず幅広い分野に裾野を広げ、将来の産業構造や社会的要請も意識しながら 2050 年カーボンニュートラルのための技術開発を担う持続的な人材育成が重要である。

---

<sup>11</sup> 「NEDO 燃料電池・水素技術開発ロードマップ」(令和 5 年 2 月 9 日)([https://www.nedo.go.jp/library/battery\\_hydrogen.html](https://www.nedo.go.jp/library/battery_hydrogen.html))

### 3. 期待する波及効果

#### ・目標達成後に期待する効果

- 水電解・燃料電池・水素貯蔵をはじめとした水素技術の TRL 増加や企業への引き渡しによる水素社会基盤構築への貢献
- 材料からセル開発と評価・解析までの総合的な研究開発体制・環境の構築や、大学院生等を含む若手研究者の育成等の高度人材の輩出による、本分野における我が国の技術リーダーの地位の確保・維持
- 優れた研究成果の創出(論文、特許等)による国際競争力の強化

#### ・CO<sub>2</sub>削減効果、経済波及効果等の社会・経済インパクト

##### ➤ 経済波及効果

長期的に水素を安定的かつ大量に利用可能な水素社会の実現に向けては、需要・供給双方の取り組みの推進が重要である。グリーン成長戦略で掲げられているとおり、水素の供給コストを化石燃料と同等程度の水準まで低減させるとともに、供給量の引き上げを目指す。グリーン成長戦略によれば、2050年時点で1割の水素が国際市場で取引されていると仮定すると、その取引市場は最大約5,500万トン/年(約5.5兆円/年)となることが見込まれており、大きな経済波及効果が期待される。

表 1. 将来的な水素コストと供給量目標

	現在	2030年	2050年
コスト	約100円/Nm <sup>3</sup>	30円/Nm <sup>3</sup>	20円/Nm <sup>3</sup>
供給量	約200万トン/年	300万トン/年	2000万トン/年

##### ➤ CO<sub>2</sub>削減効果

再生可能エネルギーを電源とした水電解等によって、製造工程においてCO<sub>2</sub>を排出せずに製造された水素は「グリーン水素」と呼ばれる。一方、現在は石炭や天然ガスなどの化石燃料をもとに製造された「グレー水素」が主流である。グリーン成長戦略によると、CCSを考慮した「ブルー水素」も含めたクリーン水素の供給量の目標として、2030年には約42万トン以上を目指すがあり、現在のグレー水素がクリーン水素に置き換わるとすると、最大約500万トン/年のCO<sub>2</sub>削減効果が期待できる<sup>12</sup>。さらに大量のグリーン水素の供給網の実現に加えて、水素貯蔵の飛躍的な高密度化と燃料電池の技術革新が実現すれば、例えば燃料電池を搭載した重負荷トラックにおいて、1回の水素充填当たりの航続距離と走行性能

<sup>12</sup> 利用したパラメータ(天然ガス改質を想定して算出): 想定導入量: 42万トン/年、排出係数: 1.07kg-CO<sub>2</sub>/Nm<sup>3</sup>-H



が現状のディーゼルエンジン駆動車と同等以上となることが可能になり、水素エネルギーへの転換が期待できる。すなわちこれらの実現により、水素の利用を燃料電池用途とした場合を例にとると、国内外のトラック輸送分野で約 10 億トン／年の CO<sub>2</sub> 削減効果が期待される<sup>13</sup>。

#### 4. 研究開発テーマ

・研究開発目標の達成に向けた各研究開発テーマ名および研究開発内容

本事業では、2 項で示した考え方に基づき、アカデミアが実施すべき研究開発テーマとして、水電解・燃料電池システム、水素貯蔵システム、先端計測・共通解析・DX を設定する。これらの研究開発テーマにおいて、短期課題：企業の技術開発の中で隘路となっている基礎課題の解決（3 年程度）、中期課題：近い将来企業が実用化することが期せる新技術開発（5 年～7 年程度）、長期課題：現時点で企業の実用化検討に至っていないが、将来的な構造転換を引き起こす可能性のある革新的技術開発（7 年～10 年）をそれぞれ設定し、以下に例示する。

##### ➤ 【研究開発テーマ 1】高効率・高耐久・低コスト化を可能にする水電解システムの実現

◇ 研究開発内容：

再生可能エネルギーをエネルギー源とした水電解装置は、既にアルカリ形や固体高分子形において社会実装が進められている。アルカリ形は電極触媒に貴金属を使用する必要がない反面、高電流密度での運転が困難で、再生可能エネルギーの出力変動への追従性が弱いなどの課題がある。一方で強酸性電解質膜を使用した固体高分子形は出力変動への追従に強いが、電極触媒に酸性下で耐食性と活性の高い貴金属を両方の電極触媒に使用する必要がある。貴金属（Ir など）は供給資源量の制約もあり、使用量の大幅低減やリサイクルなどに取り組む必要がある。また、双方において劣化機構の解明に基づく高耐久化などの学理解明が期待される技術課題も残されている。水素の更なる一般普及に向けては、効率良く安定的かつ大量に水素を供給できることが必要であり、更なる高効率・高耐久・低コスト化が必要不可欠である。本研究開発テーマでは、社会実装が進みつつある既存の水電解システムにおける喫緊の技術課題の解決に加え、新しい原理・材料に基づく水電解システムの社会実装に向けて、研究開発を行う。

---

<sup>13</sup> 利用したパラメータ（HDV を想定して算出）：想定導入台数：1,500 万台、想定走行距離：10 万 km/年、想定燃費：4.04 km/L、排出係数：2.58 tCO<sub>2</sub>/kL

- ◇ 想定される取り組むべき短期課題例：
    - ・固体高分子形水電解の画期的性能を実現する技術革新  
(例：電極触媒の極低貴金属化(貴金属のリサイクル等も含む)、耐食性・低コスト集電体の開発)
    - ・企業の更なる生産性向上のための効率・耐久性向上や低コスト化に資する技術開発  
(例：高耐久化に資する逆電流メカニズムや構成材料等の劣化メカニズムの解明)
  - ◇ 想定される取り組むべき中期課題例：
    - ・中性水溶液を電解質とした水電解システムの開発
  - ◇ 想定される取り組むべき長期課題例：
    - ・固体高分子形水電解等における究極の性能実現、アニオン交換膜形もしくは新しい原理・材料に基づく水電解システムの確立  
(例：電極触媒の貴金属フリー化、フッ素系高分子に替わる電解質材料の開発、劣化機構解明に基づく寿命予測・加速劣化評価法(10分の1~20分の1)の開発、セル内気液二相流体解析、反応界面での物質移動解析)
- 【研究開発テーマ 2】高効率・高耐久・低コスト化を可能にする燃料電池システムの実現
- ◇ 研究開発内容：
 

水素燃料を供給する燃料電池は既に定置型や乗用車(FCV)等の用途において社会実装が進められているが、特に大型トラック等のHDV用途における今後の利用拡大が期待されている。しかし、多用途展開においては、システム化した際の材料コストや燃費、出力密度、積載重量など技術的課題が様々あり、高効率・高耐久・低コスト化の全てを満たす燃料電池システムの開発が重要である。例えば既に実用化されている固体高分子形燃料電池においては、生産期間短縮のためのMEA活性化の迅速化、セパレータ材料や電解質膜等の劣化メカニズムの解明に基づく高耐久化、電極触媒の高活性化と貴金属使用量の大幅な低減の両立等に加え、燃費・コスト等の課題解決に資する中電流密度域の性能向上や、低加湿域の性能向上が求められている。本研究開発テーマでは、これらの課題に加えて、アニオン交換膜形燃料電池や新しい原理・材料に基づく燃料電池システムの開発により、燃料電池の多用途展開および社会実装に貢献する。
  - ◇ 想定される取り組むべき短期課題例：
    - ・企業の更なる生産性向上のための効率・耐久性向上や低コスト化に資する技術開発

(例: MEA の迅速活性化、セパレータ材料も含めた劣化メカニズムの解明、中電流密度域の性能向上)

◇ 想定される取り組むべき中期課題例:

・固体高分子形燃料電池などの画期的性能を実現する技術革新

(例:  $-30^{\circ}\text{C}$ ~ $120^{\circ}\text{C}$ までの広作動域電解質膜開発、薄膜化、電極触媒活性の飛躍的向上や貴金属使用量の大幅低減、低加湿域の性能向上(広温度域の酸素還元触媒機構解明))

◇ 想定される取り組むべき長期課題例:

・アニオン交換膜形もしくは新しい原理・材料に基づく燃料電池システムの確立

(例: 電極触媒の貴金属フリー化、フッ素系高分子に替わる電解質材料の開発)

➤ 【研究開発テーマ 3】高密度・高耐久・低コスト化を実現する水素貯蔵システムの開発

◇ 研究開発内容:

水素エネルギーの利活用において、高密度で安全な貯蔵システムを実現するための材料開発が主要なボトルネックとなっており、液化アンモニアと同等レベルの水素貯蔵密度を常温、常圧で達成するための新規材料の開発を目指す。合金やナノ・マイクロ構造制御等による水素貯蔵密度の飛躍的向上や、現状では解明されていない超高压から常圧までの水素化挙動の解明とそれに基づいた次世代水素貯蔵システムの開発等により、ゲームチェンジとなりうる水素貯蔵材料とその利用法とシステム化の研究開発を実施する。

◇ 想定される取り組むべき中期課題例:

・新規材料を用いた高压水素貯蔵システムの開発

(例: 常圧から超高压における水素化挙動の解明)

◇ 想定される取り組むべき長期課題例:

・革新的水素貯蔵法の開発とシステム化

➤ 【研究開発テーマ 4】先端計測・共通解析・DX の基盤構築と活用

◇ 研究開発内容:

本領域における材料探索や機能・劣化機構の解析には、表面構造や電子状態を詳細に把握することが必要であり、高い時間的・空間的分解能を有する大型放射光や中性子実験施設等を用いた先端解析と計算科学が有効である。特に水電解や燃料電池においては、三相界面での触媒や担体の挙動を直接解析することや、反応進行中におけるオペランド解析が有効であり、

SPring-8 や NanoTerasu の使用が想定される。また、燃料電池におけるセルレベルでのオペランド解析や、水素貯蔵材料の解析などについては、原子番号の小さな水素に有効な中性子線の使用が有用と思われる。これに加え、幅広い範囲での探索の高速化も不可欠であり、MI 等の手法を用いた研究開発基盤の構築や、データ取得・蓄積の効率化のための DX ツールの検討や自動・自律実験法等の開発を行う。さらに、複数の計測や解析技術を組み合わせた手法など、DX と解析の融合による基盤構築も、効果的・効率的な実験手法の確立において有効と考えられる。これら課題は各研究開発テーマの推進にあたって必須であり、各テーマを実施するチーム内での推進に加え、他領域（特に蓄電池領域）の基盤も活用しつつ、領域横断的に連携しながら研究開発を促進する。

・各テーマの達成目標およびマイルストーン、ステージゲート設定

以下に、各研究開発テーマにおいて想定される達成目標やマイルストーンについて記載するが、あくまで例示であり、各提案においては申請者が自ら研究開発テーマの目的に適した合理的かつ野心的な目標を設定しチーム全体として取り組むよう求める。また、研究成果の産業界への展開に向けて、必要十分な研究開発目標やスケジュールが設定されていることを求める。各研究開発テーマにおいては、設定された達成目標・マイルストーンをもとに、ステージゲート評価において達成状況を確認し、研究開発の継続可否、また研究開発体制の見直し等を行う。

➤ 【研究開発テーマ 1】高効率・高耐久・低コスト化を可能にする水電解システムの実現

既に社会実装が進められているシステム系（例えば固体高分子形水電解やアルカリ形水電解等）における更なる社会実装の拡大等における技術課題[劣化メカニズム等の学理解明や、電極触媒の貴金属使用量の大幅低減（貴金属のリサイクル等も含む）、電解質膜の耐久性向上等]については、短期的（3 年程度）での成果創出を行い、その後は産業界等への成果展開を目指す。また、既に社会実装されているシステムのみならず、未だ実用化には至っていないが、高効率・高耐久・低コスト化の観点で性能革新が理論的に望まれるシステムについても、社会実装を見据えたシステム確立を目指す。例えば中性電解液を用いた水電解を対象とする場合は 3 年程度、アニオン交換膜形水電解システムを対象とする場合は 5～7 年程度を目処に、材料開発の検討と並行してスケール化の見通しも含めた検討に取り組む。スケール化の有効性が認められた場合には、中性電解液形は 5～7 年程度、アニオン交換膜形については最長 10 年の研究開発期間をかけてシステム実現に取り組む。加えて、固体高分子形水電解等においても、いま

だシーズ探索の段階にある、貴金属フリー化の実現や短時間での寿命予測など、チャレンジングであり技術革新をもたらす課題については、得られた研究成果に基づき長期の研究開発期間をかけて取り組み、究極の性能実現を目指す。セル内気液二相流体解析、反応界面での物質移動解析など、高電流密度化に資する学理解明にも取り組み、形式にとらわれず、学理を組み合わせることでシステム確立を実現する。アニオン交換膜形や中性電解液の水電解においては、非貴金属電極触媒などの技術連携が見込めるほか、固体高分子形水電解におけるスタック技術などもこれらに展開できることが期待され、チーム内で連携しつつ一体となって研究開発を推進することが望まれる。

➤ 【研究開発テーマ 2】高効率・高耐久・低コスト化を可能にする燃料電池システムの実現

既に乗用車用に搭載が進められている固体高分子形燃料電池の生産期間短縮のための MEA の迅速活性化、セパレータ材料も含めた劣化メカニズムの解明、燃費・コストの課題解決のための中電流密度域の性能向上等について 3 年程度の短期間での成果創出を行う。HDV の FC 化を目指し、更なる性能向上と高耐久化・低コスト化に関する課題、例えば劣化メカニズム等の学理解明や電極触媒の活性向上や貴金属使用量の大幅低減、電解質膜の耐久性向上、低加湿域の性能向上（広温度域の酸素還元触媒機構解明）等について、5～7 年程度を目処に成果創出を目指し、期間後は社会実装に向けた成果展開が望まれる。また、社会実装に至っていないが将来的に構造転換を起こしうると期待されるアニオン交換膜形燃料電池や、新たな原理・材料による燃料電池系を対象とする場合は、5～7 年程度を目処に MEA を含む材料開発・評価を行いつつ、スケール化も見通した検討に取り組み、システムの確立について最長 10 年間の研究開発期間をかけて長期的に取り組む。なお、水電解とは共通技術が多くあることから、研究開始当初からの連携が望まれる。

➤ 【研究開発テーマ 3】高密度・高耐久・低コスト化を実現する水素貯蔵システムの開発

水素吸蔵合金は、これまで主に常圧下で研究されてきたが、HDV に搭載するために必要な水素貯蔵密度の達成は非常にハードルが高かった。他方、最近、超高压下で極めて高い密度で水素貯蔵できるスーパーハイドライドが注目されている。従来研究の枠を超えて常圧から超高压までの水素化挙動を解明し、革新的な水素貯蔵材料の開発を目指す。さらにナノ・マイクロレベルでの構造制御による高密度化を進める。これらにより、液化アンモニアと同等レベルの貯蔵密度を常温、常圧で実現するための研究開発と、スケール化を推進する。そのためには、

現時点で未整備である評価解析装置群の整備・ネットワーク化に短期的に取り組む必要がある。その上で、これら装置群を用いて、拡張した探索条件における機構解明と高圧水素貯蔵システムの開発について 5～7 年程度を目処に取り組み、その成果に基づき革新的性能を有する新規材料の創出・システム化を最長 10 年間の研究開発期間をもって目指す。

➤ 【研究開発テーマ 4】先端計測・共通解析・DX の基盤構築と活用

研究開発の加速のための DX 推進にあたり最も重要なことはデータの効率的・効果的な蓄積である。まず、データを集積する場所を整備し、研究開発現場で日々生み出される様々なデータを効率的に集める方法、そして集めたデータの効果的な利活用法を開発する必要がある。データを集積する場所は共通基盤として整備することが有効であるが、データを集める方法とその利活用法は各チームにおいて短期的に取り組むこととする。文部科学省のマテリアル DX プラットフォームなどとの連携も検討する。そのような蓄積データと MI 等を用いた材料探索の加速、探索領域の圧倒的な拡大と効率化を可能にする自動・自律実験に継続的に取り組む必要がある。ハイスループット化を可能にする実験の自動化およびその後の自律実験の実現に 5 年程度を目処に段階的に取り組み、水素分野における DX 基盤構築を実現する。さらに、先端計測・共有解析技術を用いた解析も非常に重要であり、水電解・燃料電池においては反応進行中の触媒界面での酸素原子や気泡、触媒担体の挙動や、水・プロトン・酸素の移動現象等に関するオペランド解析等により、反応機構解明等を実現する。水素貯蔵においても、金属材料、高分子材料、ナノ・マイクロ構造材料の構造解析や水素雰囲気における材料中の水素原子の動的挙動解明等を行う。また、複数の計測や解析技術を組み合わせ合わせた手法等の有効性の検証を短期的に行い、有効性が認められた場合には 5 年程度を目処に基盤構築を検討する。これら DX・計測・解析における基盤については、蓄電池領域において構築される基盤も活用し、新たな研究手法も導入しつつ、得られた蓄積データ等も含め長期的にプラットフォームとしての確立を図る。

・想定される研究開発体制

➤ チーム型研究

- ◇ 本領域では、上記の研究開発テーマを実施する複数の「研究開発チーム」を構成する。
- ◇ 研究開発を実施する上での基本単位となるチームは、チームリーダーを中心とし、要素技術や材料を開発する研究者、反応機構や劣化機構等の先端解析を担当する研究者のみならず、それらを加速する DX ならびに計算科学担当の研究者、

開発材料を用いて組み立てた単セルの性能を評価する研究者、開発材料のスケール化の見直しなどのトータルとしてのシステムを俯瞰・検討できる研究者などから構成される。チームリーダーは複数の要素技術グループをまとめ、各研究開発を行いながら社会実装を踏まえた材料・技術の複合化やシステムの最適化までを一体的に推進できる研究開発体制とする。

- ◇ チームの構成にあたっては、従来から水素関連の研究を行っている研究者のみならず、これまで水素研究に参加していなかった多様な分野の研究者（計測・解析技術、計算科学、情報科学、物性物理、有機化学など）の積極的な参画により、新たな課題に挑戦していくことを推奨する。
  - ◇ 【研究開発テーマ 4】先端計測・共通解析・DX の基盤構築と活用については、各テーマ 1～3 を実施するチーム内に含めることが望ましく、各チーム内での推進に加えて領域横断的に連携しながら研究開発を促進することとする。
  - ◇ 短期課題への取組においては、研究開発開始から社会実装までの期間が短いことから、実用化までの道筋を明確に描いた上で開始することが特に重要であり、出口を担う受け手の参画や連携等を推奨する。
  - ◇ 水電解・燃料電池等の研究開発においては、その性能評価を共通プロトコルで行うことが想定されるため、技術研究組合等、社会実装に向け知見を有する機関の参画や連携も推進する。
  - ◇ 水電解と燃料電池の研究開発テーマにおいては共通技術が多いことから、各材料開発をはじめとし、実用化までの課題を即時共有し、共通の技術課題解決に向けて連携をしながら研究開発を行う等、チーム間連携を図るための機会を適宜設定する。
  - ◇ 研究進捗に応じてチームの再編・追加を検討する。また、戦略的創造研究推進事業「先端的カーボンニュートラル技術開発 (ALCA-Next)」等 JST 関連事業からの移行によるチーム体制への追加等についても、PO 判断のもと必要に応じて検討する。
  - ◇ 初年度の公募で構成されたチームを大前提とはせず、他の研究組織等との連携による新たな結合が期待される場合等は、必要に応じて公募等の方法により、機動的にチーム構成の見直し等を行う。
- 革新的要素技術研究
- ◇ 原則として、公募は「研究開発チーム」が対象となるが、幅広い分野からの研究者を含めてオールジャパンで研究開発構想に取り組むため、各研究開発テーマ 1～3 に貢献しうる水電解・燃料電池・水素貯蔵の 1 つの要素技術に特化した研究開発等についての提案を可能とする。これらは採択された場合、PO 等によってチーム体制への合流を調整する。

・予算

総額約 175 億円程度

## 5. 研究開発マネジメント

### ・評価の進め方

- PO は、研究開発の進捗状況や研究開発成果を把握し、領域アドバイザーや外部専門家の協力を得て、研究開発課題のステージゲート評価および事後評価を実施する。また、関連動向(国内外の技術動向、国内／グローバル市場の動向、標準化、規制・制度面等)や、LCA の観点からも助言を行えるよう、人文・社会科学の知見や多様な外部人材等を活用しながら課題を推進する体制を整え、詳細な手法について検討する。本事業におけるステージゲート評価は原則3年度目と5年度目に行うほか、研究課題の性質を踏まえ、各年度においても必要に応じて、POによるチーム体制や方向性等の評価・見直しを行う。
- ステージゲート評価および事後評価は、研究開発の開始当初に計画された研究開発期間の途中段階あるいは終了時点において、POが各評価基準に基づき評価する。ステージゲート評価は、採択時点での研究シーズの多様性を確保しつつ、当該領域全体でより効果的な研究開発成果を得るために実施する。
- ステージゲート評価にあたっては、アカデミアの関係者だけでなく、企業等の関係者の協力を得て、技術の革新性や将来的な研究領域開拓の可能性、社会実装の可能性、国際競争力などの多角的な観点から評価を行う。その際、直近の研究進捗のみならず、今後の研究進捗の余地や、当該技術が持つ将来的な市場波及性等から総合的に評価することにも留意する。
- ステージゲート評価の結果、目標とする研究開発成果が得られることが困難と判断された研究開発課題については、その時点で研究開発を中止する可能性がある。
- 目標達成の評価方法
  - ◇ 研究開発テーマ毎の目的性を踏まえた上で、GHG削減効果・経済波及効果に対して量的な貢献等に繋がるか、産業界の抱えるボトルネック課題解決への貢献に繋がるか、科学的にも優れたものであり革新性があるか、などという観点で、提案者自らが設定した目標に対し、総合的に達成度を評価するものとする。研究開発テーマ毎の一体的な評価に加え、各材料開発などの要素技術の発展についても、評価に加味することとする。
  - ◇ 企業等の参画など、研究成果の展開に資する研究開発体制が構築出来ていたか、各分野における高度人材輩出に向けて、積極的な学生・若手研究



者の巻き込みを行っているかなどについても評価の観点とする。

・データ活用(DX)や大型放射光施設等との連携

- 積極的に DX ツールを活用し、日々創出される実験・計算データを自動的に蓄積するシステムなどを構築し、データの効果的利活用により研究開発の加速を目指す。MI や実験の自動・自律化等、新たな研究手法も積極的に取り入れることを検討する。
- また、既存の大型放射光施設等<sup>14</sup>や、スーパーコンピュータ「富岳」等について、領域で横断的な利用体制を構築する。有効な計測技術や計算・データ基盤を活用しながら、オールジャパン体制で装置利用および成果の最大化を図る。また、大型の設備や水素研究に効果的な設備で全国的な利用ニーズは高いが、一機関においては使用頻度が限られる設備、管理・運用経費が高額の設備等については、中核となる機関に技術職員等の十分なサポート体制と共に整備し運用を行う等、参画機関間の相互扶助のネットワークを形成することとする。
- 特に蓄電池領域など、他の領域と共通する材料評価装置や解析技術、課題(触媒、固体高分子、劣化機構解明、データ活用等)への取り組みについては、共同体制の構築や定期的なコミュニケーションを実施する。
- PO 等を中心に各分野(水電解・燃料電池・水素貯蔵)における研究データの共有・公開等に係るデータ戦略を策定する。チーム内の研究グループにおいても、その範囲を適切に定めるとともに、ネガティブデータを含めたデータの蓄積方法や、標準的なデータ形式、データ管理ツール等を適宜検討し、必要に応じてデータ戦略の見直し・反映を行う。

・人材育成、国際連携

- 研究開発にあたっては、電気化学や触媒化学研究者のみならず、有機化学、材料科学、化学工学、資源工学、金属工学、社会科学など、多様な分野における研究者の参画を推奨する。人材育成の観点でも、大学院生等のチームへの参加も推奨する。
- 国際的な成果展開、最新の研究動向の共有、研究コミュニティでのプレゼンスなどのために、研究参加者の海外派遣、海外からの受け入れ、国際会議開催など、国際連携についての支援を行う。

・知財の取り扱い

- 国際的な産業競争力の強化や事業化の推進に資する知的財産の取得、活用を

---

<sup>14</sup> SPring-8, J-PARC, NanoTerasu, 大学共同利用機関等

目指す。一元的な知的財産管理を行うため、PO 等を中心として JST 内に知的財産を運営する委員会を設置し、事業の研究開発成果の展開シナリオ等を検討した上で、本領域に係る知的財産の取扱い方針を定める。当該委員会は、研究成果について、オープン・クローズに留意しつつ、必要に応じて権利化の要否やその後の取扱いについて判断し、その結果に基づいた取り扱いを委託先の研究機関に要請する。例えば、排他力の強い特許を取得するため、必要となる追加実験の実施や、一定期間は外部発表や特許出願を遅らせる等の依頼を行うこともあり得る。

・社会実装に向けた取り組み・計画等

- 領域アドバイザーや外部専門家等に産業界有識者を取り込み、企業が抱える技術課題を把握し、社会実装に向けた議論を適切に推進できるように、産業界・アカデミアが議論する機会を定期的に設ける。経済産業省との「文部科学省・経済産業省ガバナリングボード(燃料電池等)」の開催等による政策連携や、NEDO との事業連携を検討する。
- PO を中心に、各分野(水電解・燃料電池・水素貯蔵)で研究手法や成果の公開の範囲や企業の研究参画の度合い等をあらかじめ定めたオープン・クローズ戦略を策定する。研究進捗等を踏まえ、必要に応じて適宜戦略は見直すものとする。
- PO は、むやみに研究開発期間を延ばすことなく、早期に社会実装できるものについては、その期限を待たずに実装への取組を進める。社会実装に向けては、スタートアップ創出等による成果展開も有効であることに留意する。