



マルチモーダル放射光計測 × 機械学習により燃料電池触媒探索を革新 —放射光スペクトルから性能と構造を“逆予測”する世界初のワークフローを開発—

技術研究組合FC-Cubic(バリヤン アンクル主任研究員、今井英人部長)、国立大学法人京都大学(内本喜晴教授)、公益財団法人高輝度光科学研究センターの研究グループは、世界初となる固体高分子形燃料電池に用いられる触媒について、性能と構造を同時に推定し、さらに最適構造を逆予測できる「マルチモーダル放射光計測×機械学習」ワークフローを開発しました。

固体高分子形燃料電池(PEFC)と水電解装置は、再生可能エネルギー由来の水素を活用する次世代エネルギーシステムの柱であり、2030年～2050年の脱炭素社会実現に不可欠な技術です。燃料電池は触媒、担体、アイオノマから構成されており、水素と酸素の電気化学反応を通じて電気を生成します。触媒性能の向上は依然として開発の鍵となっています。

本研究が対象としたのは、数ナノメートルの触媒粒子が大きな担体上に分散された階層構造を持つ触媒であり、表面構造、電子状態、粒子径・分布、分散・被覆状態など複数要因が絡み合っており、性能が決まります。単一の計測手法ではこれらの複雑な構造を捉えきれず、得られた情報をもとに機械学習を活用しても広大な探索空間の中で、高速・高精度で材料開発を進めるには限界がありました。

そこで本研究では、大型放射光施設SPring-8において計測可能なX線吸収分光(EXAFS、XANES)、X線回折(XRD)、X線全散乱(PDF)、X線小角散乱(SAXS)、硬X線光電子分光(HAXPES)を含む8種類の放射光スペクトルデータを取得するマルチモーダル計測を採用し、これらを統合して2400次元以上の特徴量空間(Descriptor Space)を構築しました。さらに、独自に開発した機械学習アルゴリズムを用いて、少数のデータセットからでも触媒性能を高精度に予測し、従来の評価・解析ループを約1/30に圧縮できる可能性を示しました。加えて、特徴量空間上で性能最大化点を探索し、性能から構造を逆推定する逆予測(Inverse Design)モデルを実証しました。

本ワークフローの導入により、触媒設計から合成・評価までの時間を大幅に短縮し、飛躍的な性能向上と実現する革新的触媒の開発や白金使用量削減、コスト低下、研究効率の劇的な向上が期待されます。さらに、本手法は燃料電池触媒だけでなく、水電解触媒、二次電池材料、半導体材料など多分野への横展開が可能であり、“マルチモーダル計測×AI”を基盤とする材料開発DX時代の幕開けとも位置づけられます。

本研究成果は、2025年12月2日（ロンドン時間）に Nature Portfolio の Communications Chemistry 誌にオンライン掲載されました。

論文情報

書誌情報 Commun Chem 8, 376 (2025)

題名 Machine Learning-Guided Multimodal Synchrotron Analysis Workflow for Fuel Cell Electrocatalyst Discovery

著者 Ankur Baliyan, Sarthak Verma, K. Sasakawa, M. Matsumoto, Hideo Inoue, Hideo Daimon, Yoshiharu Sakurai, Yoshiharu Uchimoto, Hideto Imai

DOI: 10.1038/s42004-025-01800-y

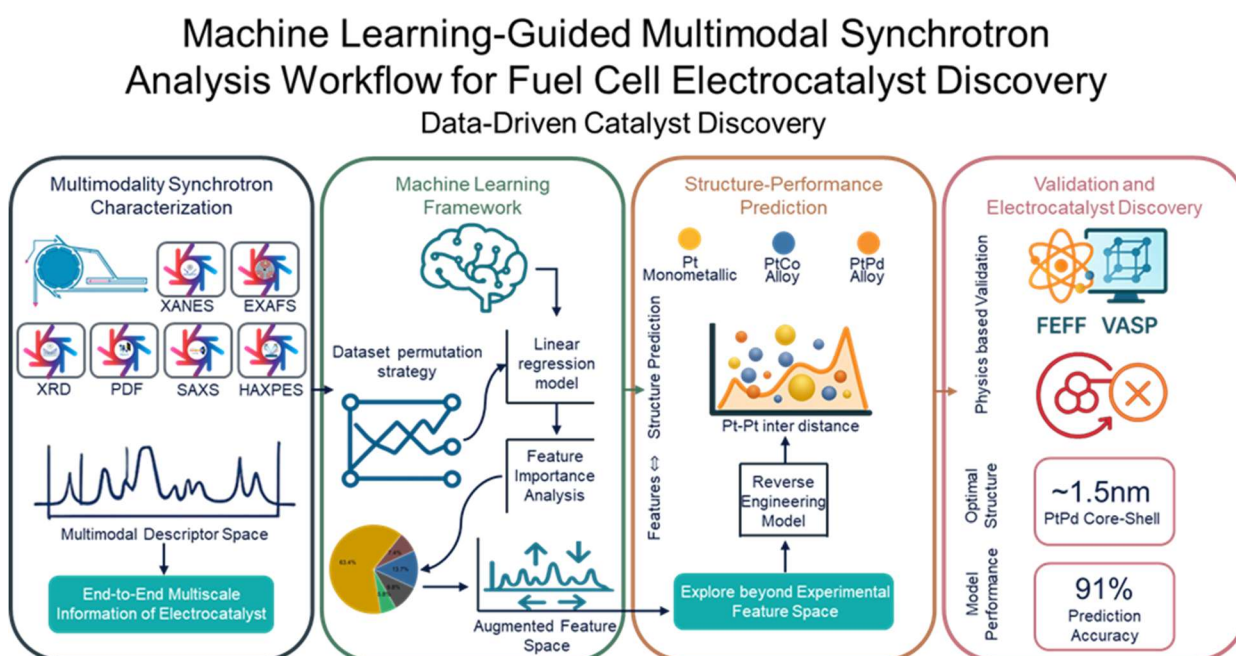


図1 開発したワークフロー概要

1. 背景

我が国では「第6次エネルギー基本計画」や「燃料電池・水素技術ロードマップ」に基づき、水素を社会実装する取り組みが加速しています。なかでも、水素を電気に変換する固体高分子形燃料電池（PEFC）は、水素社会を支える中心技術と位置づけられています。現在すでに自動車、家庭用電源、業務用電源として利用が進み、今後は建設機械、鉄道、船舶、ドローンなどへの応用も想定されています。

このような背景の下、2020年度から国立研究開発法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）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の中で材料の解析及び解析技術の高度化の技術開発に取り組みました。更に2025年度からは水素利用拡大に向けた共通基盤強化のための研究開発事業として、燃料電池・水電解の共通基盤技術開発の中で、燃料電池および水電解の材料解析共通基盤プラットフォームの構築と高度化に取り組んでいます。

燃料電池の性能を左右するのは、酸素還元反応を担う触媒です。触媒には数ナノメートルの白金系ナノ粒子がカーボン担体上に分散し、電解質であるアイオノマが被覆する階層構造が存在します。性能は、粒子径や分布、表面構造、電子状態、被覆状態など多数の要因が複雑に関係して決まります。しかし、これらすべてを同時に測定・理解することは容易ではなく、従来の研究は「合成し、性能を確かめ、条件を変えてまた作る」という試行錯誤に頼ってきました。触媒材料の探索には膨大な時間とコストがかかり、理想の構造がどこにあるのか分からない状況が続いていました。

この課題に対し当研究グループは、“マルチモーダル放射光計測 (Multimodal Synchrotron Analysis)” を核としたアプローチを導入しました。「マルチモーダル」とは、異なる複数の計測・解析手法を同じ試料に対して適用し、構造情報を立体的に捉える考え方を指します。単一の測定法では断片的な情報しか得られないが、マルチモーダル計測により、触媒の階層構造を「複数の視点から同時に観察する」ことが可能になります。

2. 今回の成果

本研究では、大型放射光施設 SPring-8 を用い、X線吸収分光 (EXAFS、XANES)、X線回折 (XRD)、X線全散乱 (PDF)、X線小角散乱 (SAXS)、硬X線光電子分光 (HAXPES) といった 8つの放射光計測を一つの試料に対して実施しました。それぞれのデータは、原子間距離、電子状態、結晶構造、粒径や分布など、別々の“眼”として触媒の姿をとらえます。これらを統合し、触媒構造を 2400 次元の特徴量として数値化した点が、今回の研究の重要なポイントです。つまり、複雑で曖昧だった触媒の構造が、“デジタルな指紋”として表現できるようになったことを意味しています。

さらに当研究チームは、機械学習を用いて特徴量と触媒性能の関係をモデル化しました。得られたモデルを逆向きに利用することで、性能が最大になる特徴量の組み合わせを探索し、そこから触媒構造を逆推定することに成功しています。これは、「作って性能を見る」という従来の手法とは対照的に、「性能の高い構造を先に示す」という全く新しい触媒開発のスタイルとなります。

また一般的に、材料研究分野では、計測データ数が限られることが多いですが、研究チームはここにも工夫を加えています。生成モデルである GAN (Generative Adversarial Network) をスペクトル解析に応用し、仮想的にスペクトルデータを生成して探索空間を広げることに成功しました。これにより、少ないデータからでも信頼性の高い予測モデルを構築し、未知領域に対する探索能力を高めることができます。

3. 今後の予定

このアプローチにより、これまで数カ月から数年を要していた触媒開発のサイクルは、最大で 10 分の 1 に短縮できる可能性が示されています。触媒の最適構造を先に提示できるため、コスト低減と開発期間短縮を両立できる点は産業界にとって大きなメリットとなると期待されます。

今回開発された「マルチモーダル放射光計測 × 機械学習」による触媒探索手法は、燃料電池にとどまらず、水電解触媒や二次電池材料、半導体材料にも応用できる汎用性を備えています。研究チームは今後、このワークフローを実装した専用ビームラインの構築や、データ処理の自動化を進める計画であり、材料研究そのものを DX (デジタル変革) へ導く基盤技術としての展開が期待されています。

本研究は、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) 2020年度～2024年度「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／水素利用等高度化先端技術開発／常温水電解の実用化基盤研究プラットフォームの構築」(JPNP20003)および、2025年度～2029年度「水素利用拡大に向けた共通基盤強化のための研究開発事業／燃料電池・水電解の共通基

盤技術開発／燃料電池および水電解の材料解析共通基盤プラットフォームの構築と高度化」(JPNP25002)の委託業務として実施されました。

4. 問い合わせ先

(本ニュースリリースの内容についての問い合わせ先)

技術研究組合FC-Cubic 業務推進部(広報) TEL:055-213-0360(代表)

E-mail : contact@fc-cubic.or.jp

【用語解説】

※1 マルチモーダル放射光計測(Multimodal Synchrotron Analysis)

1つの試料に対して、複数の放射光分析手法(EXAFS、XANES、XRD、PDF、SAXS、HAXPES など)を同時に用いて、構造・電子状態・粒子サイズなどの異なる情報を統合的に取得する解析手法。単一の測定では見えない階層構造を多角的に捉えることができるため、「材料を複数の眼で観察する」技術として注目されている。

※2 機械学習(Machine Learning)

大量のデータから規則性や相関関係を学習し、未知のデータに対して予測や分類を行う人工知能の一分野。本研究では、放射光スペクトルから抽出した多次元特徴量(descriptor)を入力として、触媒構造と性能の関係を予測するモデルを構築している。

※3 特徴量空間(Descriptor Space)

複雑な触媒構造を数値データとして表現した空間。各軸が原子間距離や電子状態、結晶構造などの物理量に対応し、多次元的に構造の違いをマッピングできる。本研究では 2400 次元を超える特徴量空間を構築している。

※4 逆予測(Inverse Design)

通常の「構造から性能を予測する」方向とは逆に、「目標とする性能を達成するための最適構造」を機械学習モデルから逆算的に導く設計手法。材料開発における探索時間の大幅短縮が期待される。

※5 GAN(Generative Adversarial Network)

データ生成を目的とした深層学習モデル。2つのネットワーク(生成器と識別器)が競い合いながら高精度なデータを生成する仕組みをもつ。本研究では、実験データが限られるスペクトル解析にGANを応用し、仮想的に新しいスペクトルデータを生成することで探索空間を拡張した。

※6 大型放射光施設 SPring-8

兵庫県播磨科学公園都市にある世界最高水準の放射光施設。高輝度・高エネルギーのX線を利用し、原子・電子レベルの構造を精密に解析することができる。材料科学・化学・生命科学・エネルギー研究など幅広い分野で利用されている。

※7 X線吸収分光(EXAFS:Extended X-ray Absorption Fine Structure、XANES:X-ray Absorption Near-Edge Structure)

X線の吸収変化から原子の並び方や電子状態を調べる手法で、触媒表面の局所構造や酸化状態を高精度に明らかにする。

※8 X線回折(XRD:X-ray Diffraction)

結晶によるX線の反射を解析して結晶構造や格子定数、粒子サイズを調べる方法で、触媒の合金化や結晶相を特定することに用いられる。

※9 X線全散乱(原子対相関関数 PDF:Pair Distribution Function)

散乱データを変換して原子間距離の分布を直接求める技術で、ナノ粒子や不規則構造の短距離秩序を把握し、構造の微細な歪みを捉えることができる。

※10 X線小角散乱(SAXS:Small-Angle X-ray Scattering)

小角度で散乱したX線を解析し、ナノ粒子の大きさや分布、形状を統計的に調べる手法で、触媒の粒径分布や凝集状態の評価に適している。

※11 硬X線光電子分光(HAXPES:Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy)

高エネルギーX線で物質内部から放出される電子を測定し、表面だけでなく深部の化学状態まで非破壊で調べる技術で、触媒内部の電子状態解析に有効である。