

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

東京大学

研究代表者 杉山 正和（先端科学技術研究センター・工学系研究科）

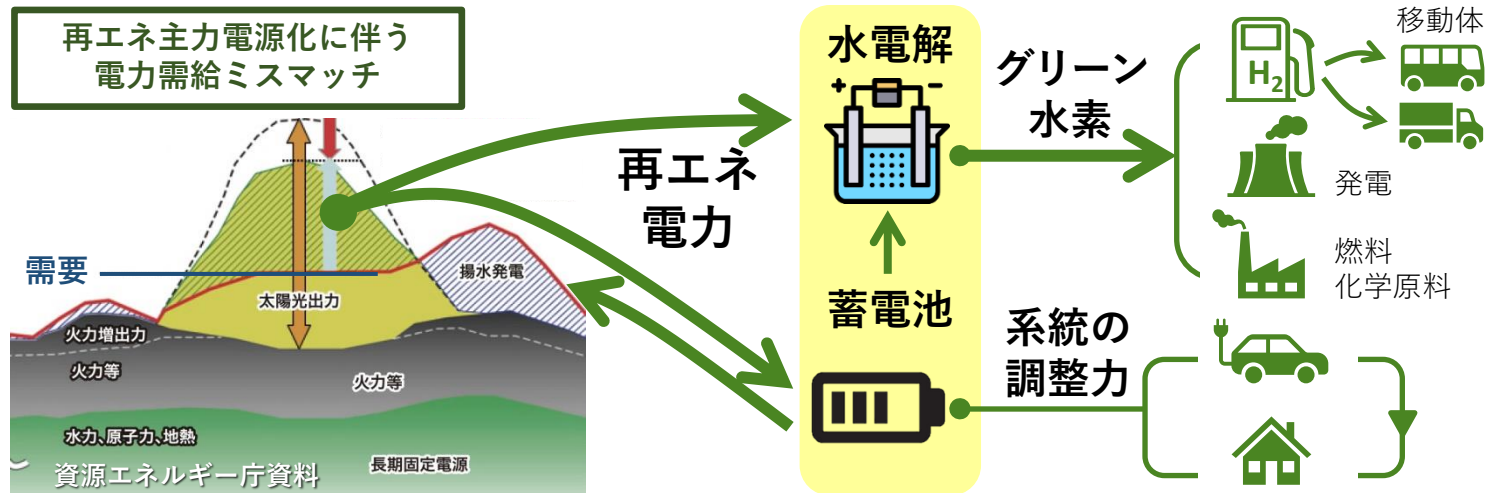
連携機関： 物質・材料研究機構
大阪公立大学，東京農工大学，東京理科大学，
東北大学，名古屋工業大学，北海道大学，山梨大学，
横浜国立大学，理化学研究所，早稲田大学



UTokyo
Green
Transformation

再エネマネジメントを担う電気化学デバイス

社会インフラとして、超大容量・低コストなどを実現する新材料が不可欠。
データ活用型材料開発の重要なターゲット。



超大容量・長寿命・低コスト・汎用元素・環境耐性

新材料創製 (電極・触媒・電解質)

巨大パラメータ空間の系統的・効率的探索



ロボット実験
×
ポピュレーション
アニーリング

ヒューマン
×
マシンコラボ

データ同化
↓
モデル高度化
インフォマティクス



大規模データ・計算・計測基盤インフラ活用

東大マテリアル先端リサーチインフラハブ
東大情報基盤センターmdx, NIMS, 富岳, NanoTerasu

マテリアル×データ総合力人材育成

材料研究者×データ科学者の融合研究
⇒ 教育プログラム展開
問題設定能力涵養・目利き人材の育成

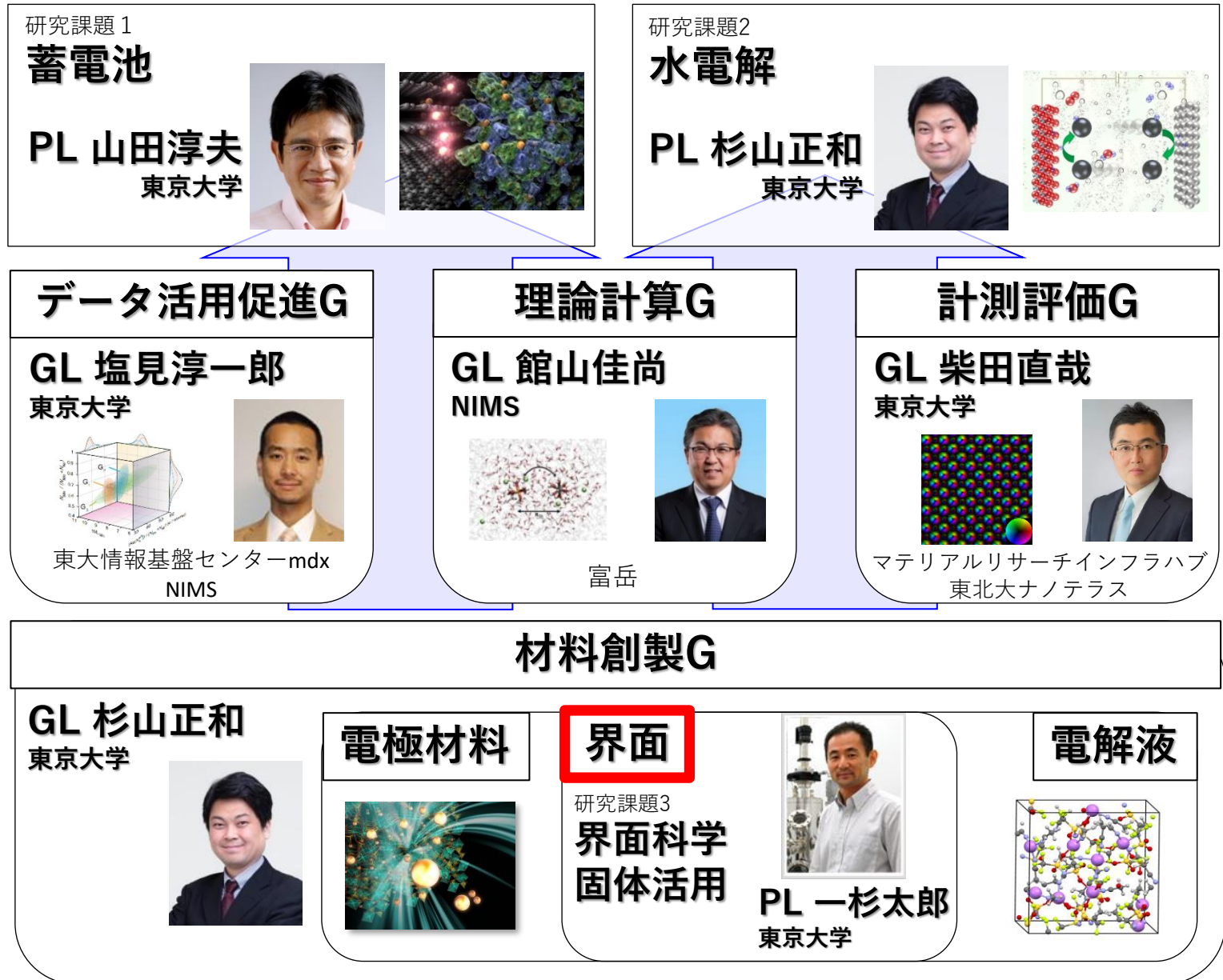
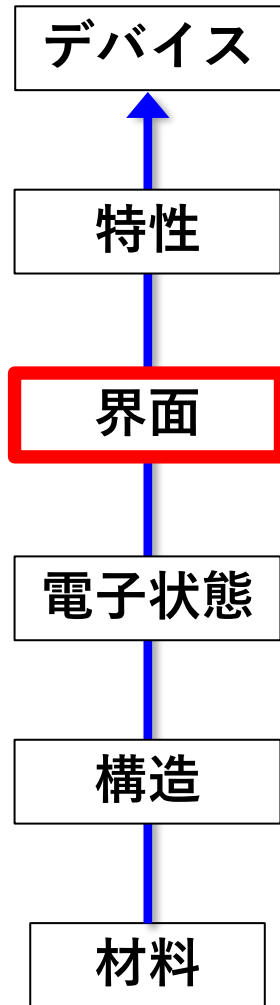
技術トレンドと課題設定

	 蓄電池		 水電解	
	液体電解質	固体電解質	液体電解質	固体電解質
現状	リチウムイオン電池 希少金属使用 (Li, Co, Ni, …) 発火リスク, 限定寿命		アルカリ水電解 強アルカリ (コスト増) 高純度の水	PEM型水電解 H ⁺ 伝導膜 希少金属使用(Pt, Ir)
今後の方向性	課題 1 超低コスト・高安定化 汎用元素転換 (Na, K, Fe, …) 超機能電解液開発 高電圧水系電池 (+ H, Zn, …)	課題 3 固体積層型電池 イオン伝導体開発 (無機/ポリマー) 連続界面形成	課題 2 中性水電解 軽度な水処理 汎用元素転換 (Fe, Mn, …) 超低コスト 長寿命	課題 3 アニオン透過膜型 汎用元素 転換 (Mn, …) 変動電源

課題 1 「汎用元素機能最大型蓄電池」	>500kWh/kg@活物質, 寿命>25年, <1万円/kWh
課題 2 「多様な水環境に適合する水電解槽システム」	中性pH領域において電流密度0.6 A/cm ² (@1.78 V)
課題 3 「固体活用型新規電気化学デバイス」	全固体電池： 無機固体 伝導体で10 ⁻² S/cm台, 高分子伝導体で10 ⁻³ S/cm台 水電解： 高分子アニオン伝導体で10 ⁻¹ S/cm台

拠点の体制（課題・グループと主要研究者）

拠点長：杉山正和

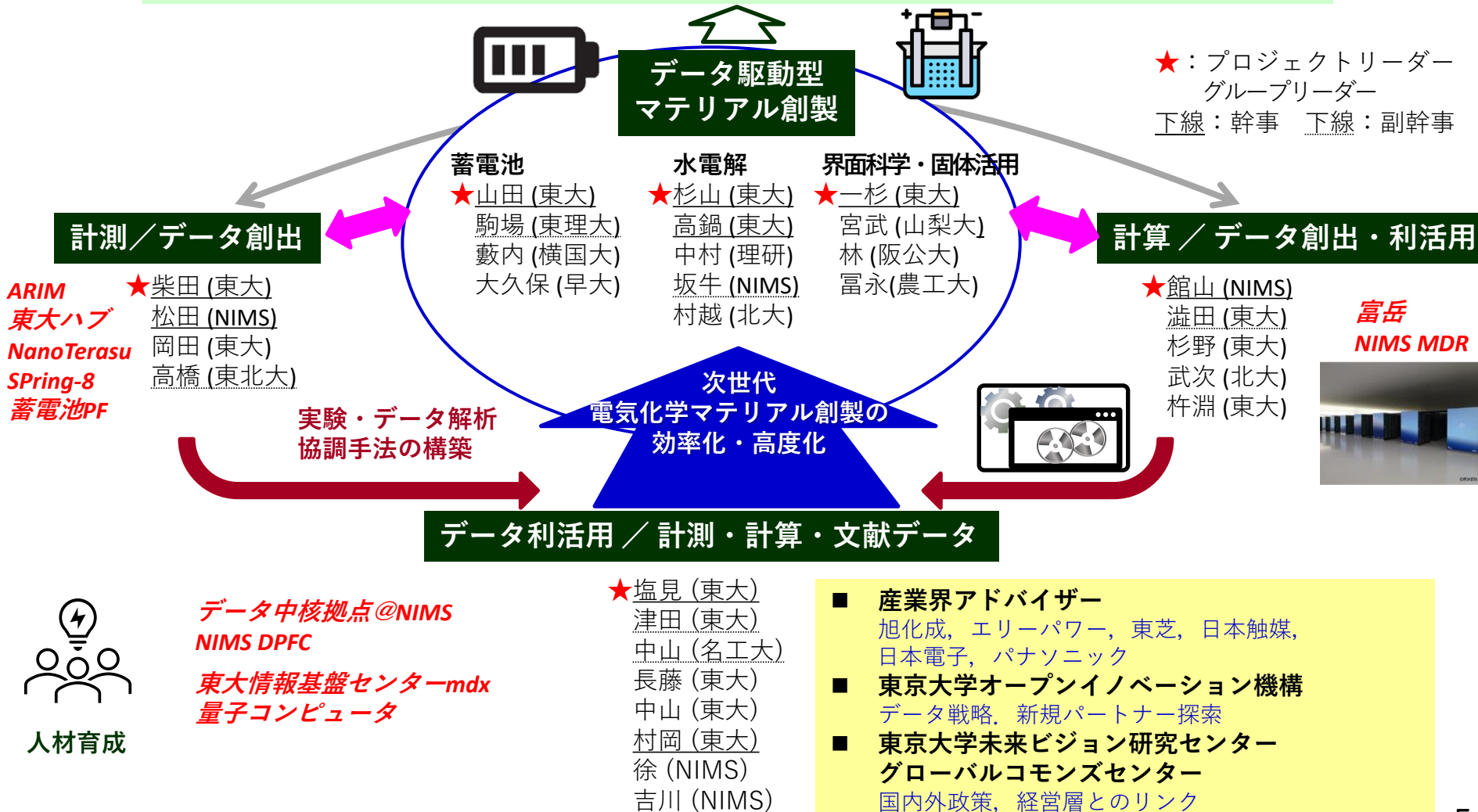


参画研究者

拠点長：杉山(東大)
副拠点長：山田(東大), 塩見(東大), 一杉(東大), 松橋(東大)

【事務局】
東京大学エネルギー総合学連携研究機構
(企画マネージャー：山下)

再生可能エネルギー最大導入に不可欠な電気化学エネルギー変換に資する
データ活用型材料開発手法の確立

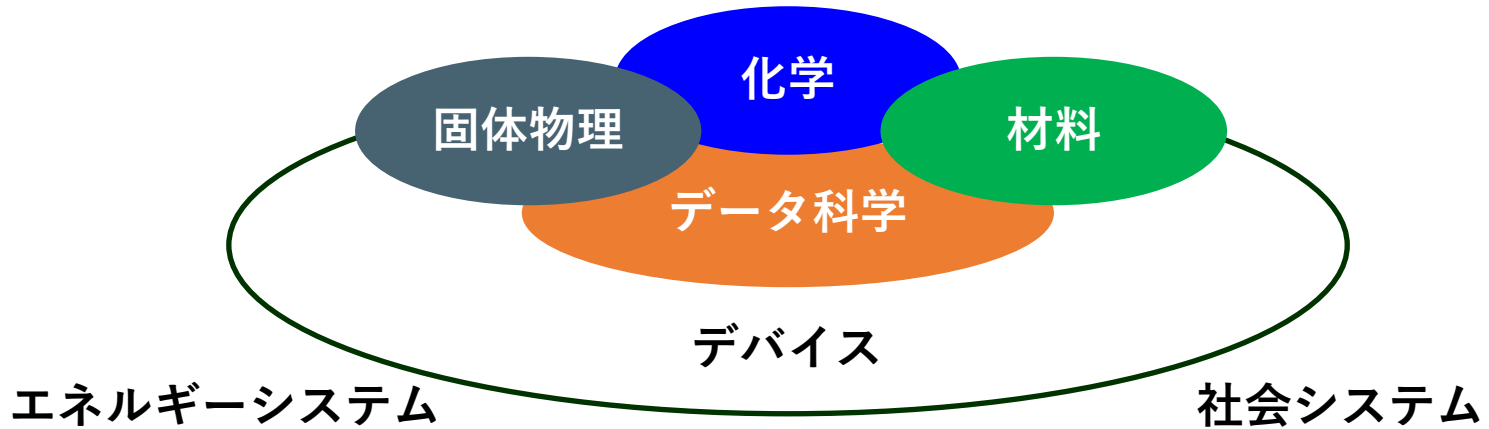


電気化学材料の「界面」に着目した異分野融合



動的な界面の学理究明
→ 材料開発の指導原理

異分野融合の取り組み



実験データの量・性質に合わせたDX方法論の開発と実践

大量・均質実験データの高速生成×量子機械学習による巨大空間探索

均一的で速いループ

実験

- ・自動実験
- ・分散型実験



データ獲得(1次, 2次)

- ・特徴量
- ・計測インフォーマティクス



機械学習(3次)

- ・最適化
- ・サンプリング



複合的で広域なループ

人間の智慧が介在

【初期】 選択/順位付け ⇒ 【究極】 思考のモデル化



データの追加・混合

- ・物質/材料データベース
- ・シミュレーション



アクション決定

- ・特徴量
- ・実験パラメータ



メカニズム(因果関係)

- ・第一原理
- ・現象論, 経験式

$$y=f(x)$$

可視化(相関関係)

- ・次元圧縮
- ・分布



ヒューマン・AIコラボレーション

仮説駆動×データ駆動

因果関係

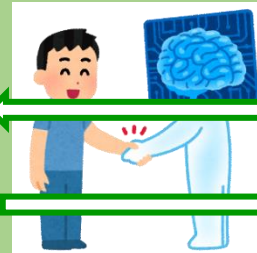
メカニズム解明

パラメータ空間設計

相関関係

説明可能なAI

空間内の自律探索



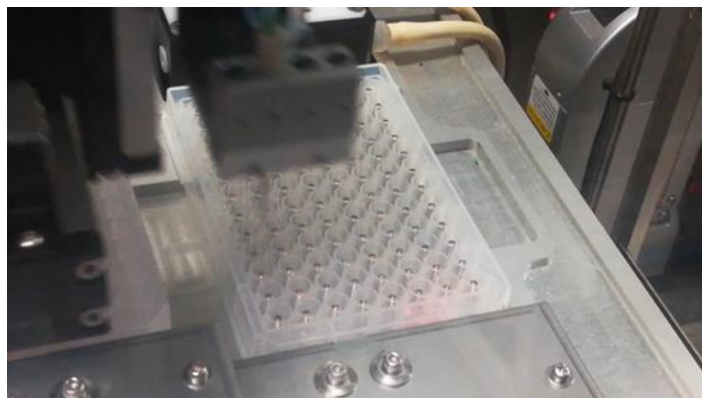
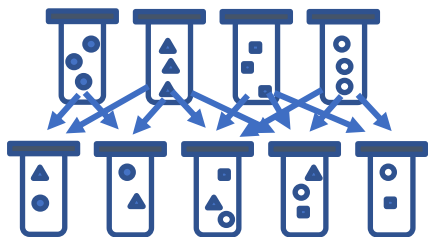
材料開発のリードタイムを短縮するロバストなDX方法論を確立!

大量・均質自動実験ロボットによる巨大空間探索

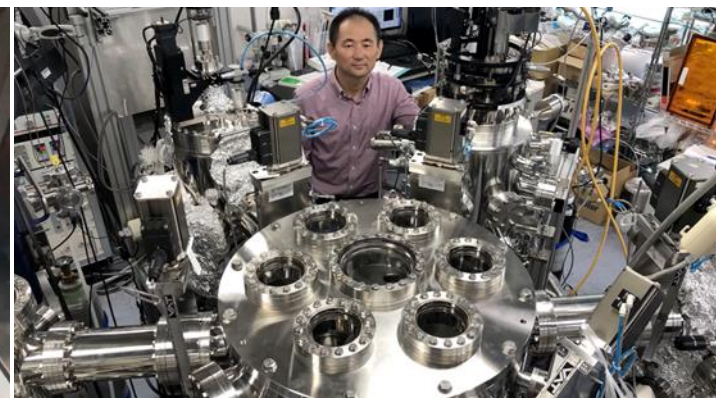
◆ 超並列・多目的最適化 電解液材料並列実験ロボット

「均一で速いループ」

電解液添加剤の
コンビナトリアル合成



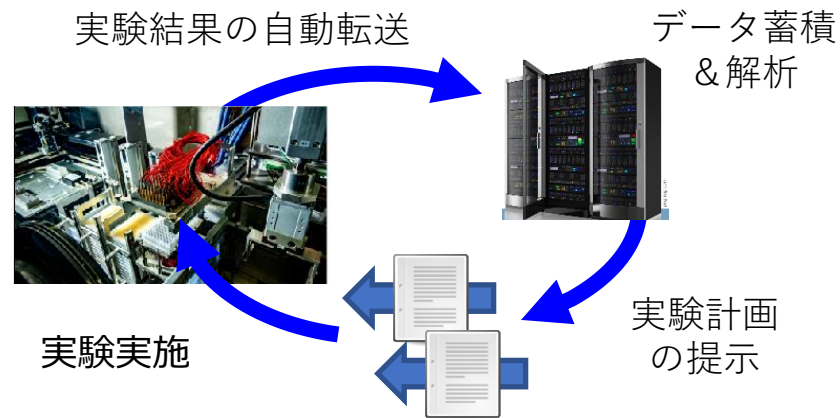
固体材料自律実験ロボット



「速いループ」では複数の実験を同時に制御可能な探索アルゴリズムが必要

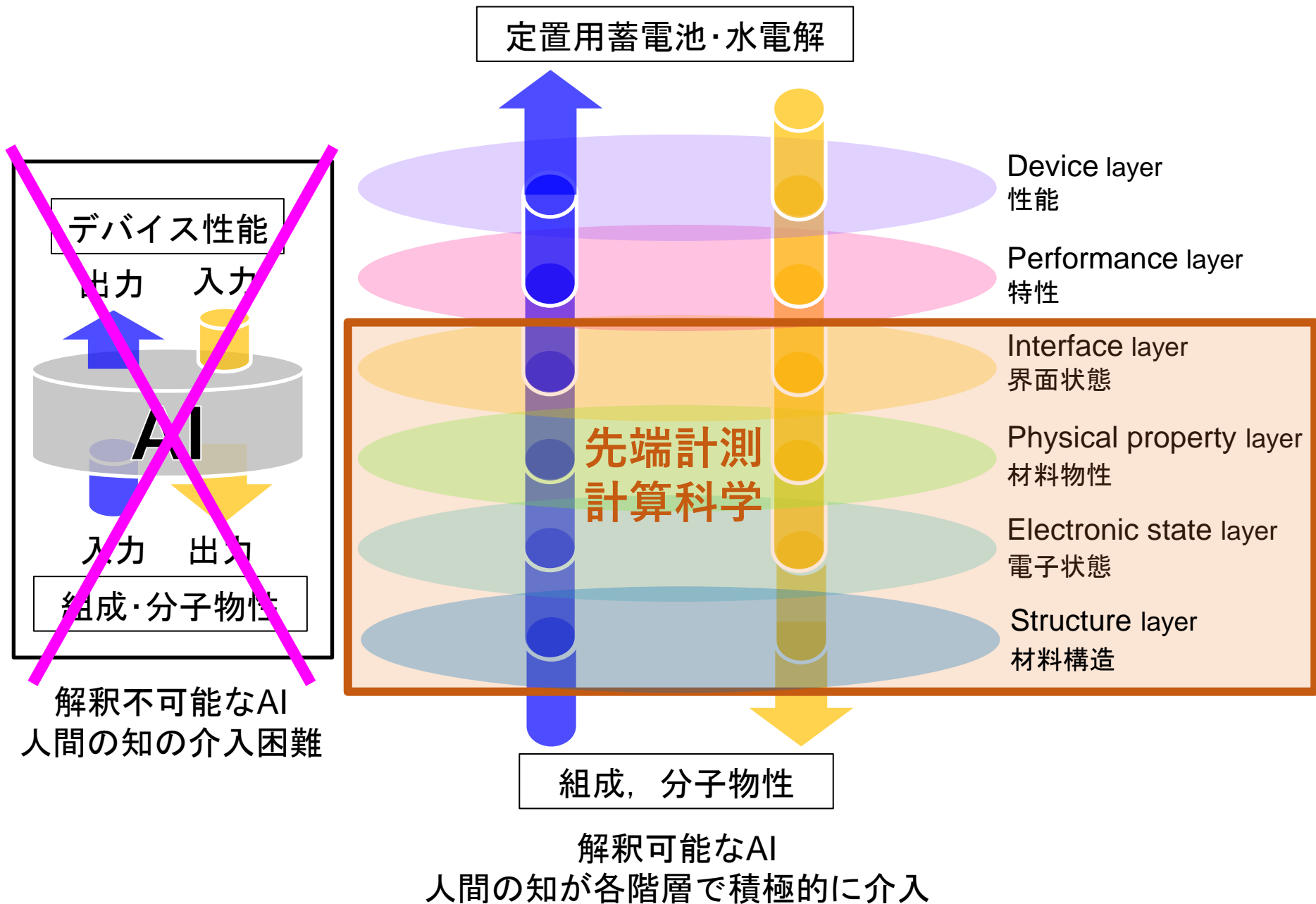
FS期間にて課題の明確化 & 対応方策検討

- ベイズ最適化に対する、**レプリカ交換モンテカルロ法**の有効性を確認
- 記述子と性能指標の分布を可視化することで、「最適化に加えて、知見取得が可能に」
→ **研究者の気づきを促進**
- 探索アルゴリズムを自動実験ロボットに実装することで、**自律的な材料探索手法**を構築可能



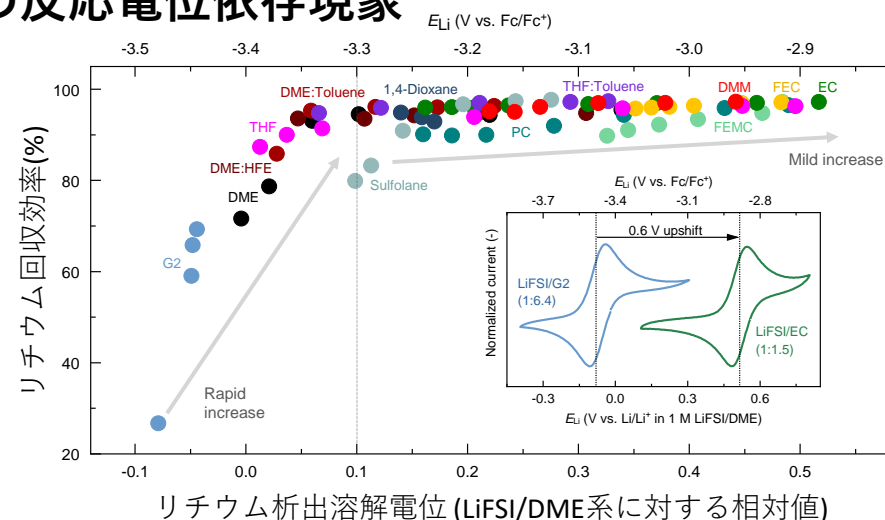
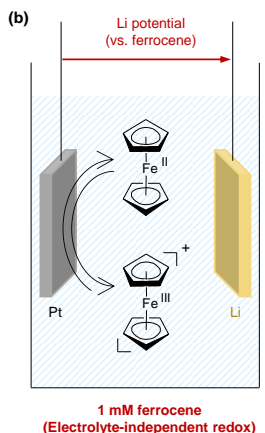
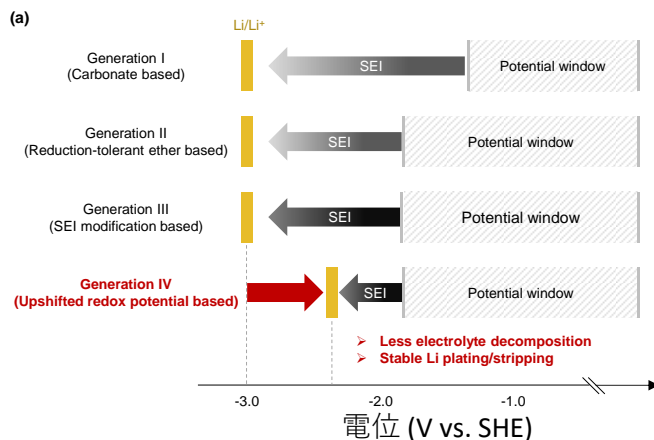
課題①Na, K電池用電解液探索
課題②水電解用電解液探索
課題③固体電解質探索
に本手法を適用

解釈可能なAIへ：多階層の相関解析

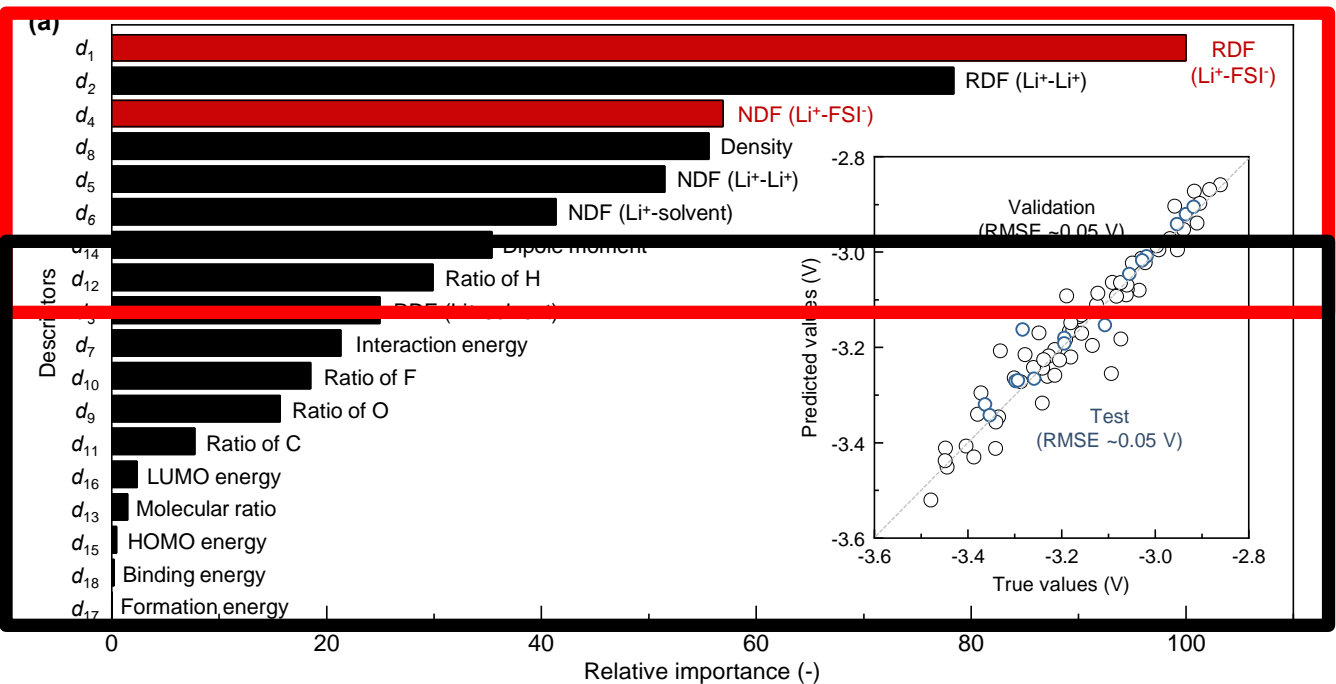


MD/DFTによる電解液構造・物性計算 + 機械学習による支配因子同定

リチウム析出溶解効率の反応電位依存現象



反応電位に対する多角的影響因子解析

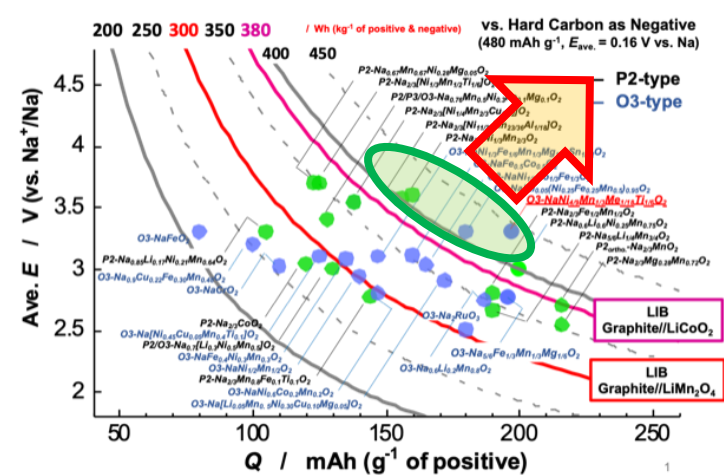
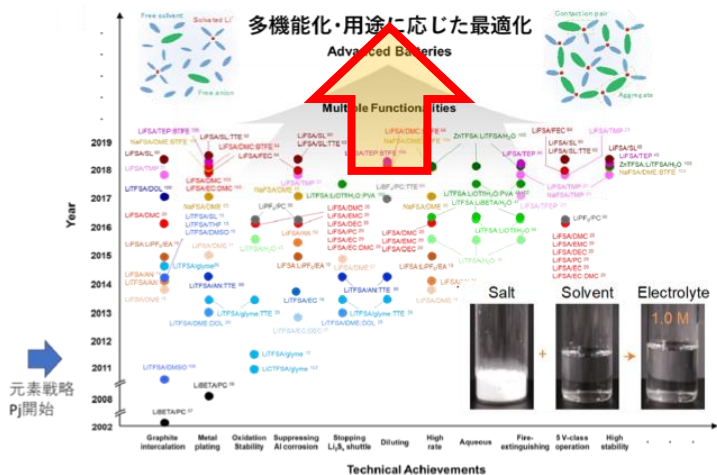


構造因子
(MD)

組成・物性因子
(DFT)

課題 1 : 蓄電池の早期社会実装と次世代シーズへの展開

世界的に随一の蓄積データベース最大活用 (リチウム・ナトリウム・カリウム電池)

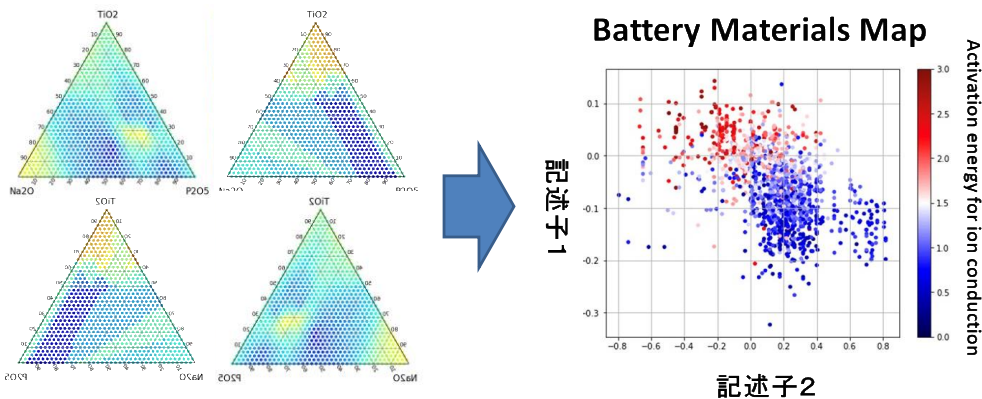


電解液：多様性のさらなる拡大と自律実験ロボット活用

電極材料：多元複雑系の効率探索のための機械学習

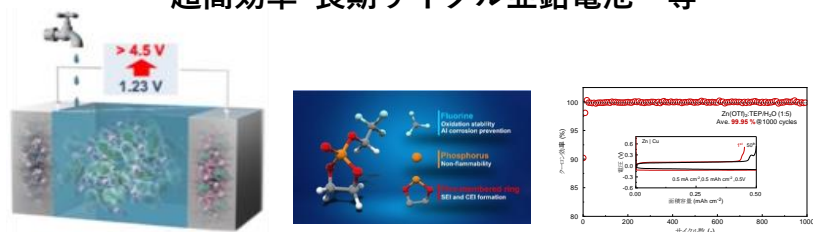
次元圧縮による含外挿空間物質探索

次世代シーズへの展開



多次元情報の人間の直感への変換

超高電圧水系電池
合理設計溶媒分子
超高効率・長期サイクル亜鉛電池 等



Nature Energy2016

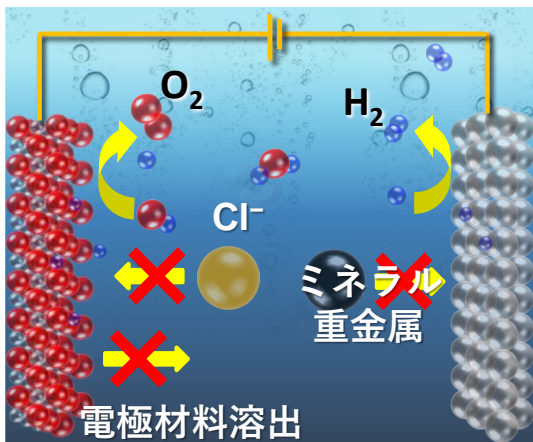
Nature Energy2020

Submitted

新たな研究方法論によるインキュベーション期間短縮

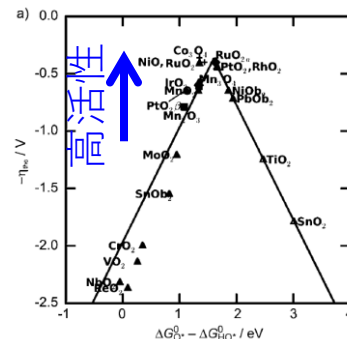
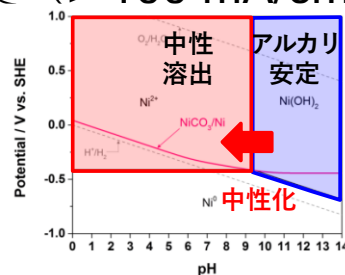
課題 2 : 多様な水環境に適合する水電解システム

桁違いの導入量を可能にする, **次世代水電解システム**を実現.

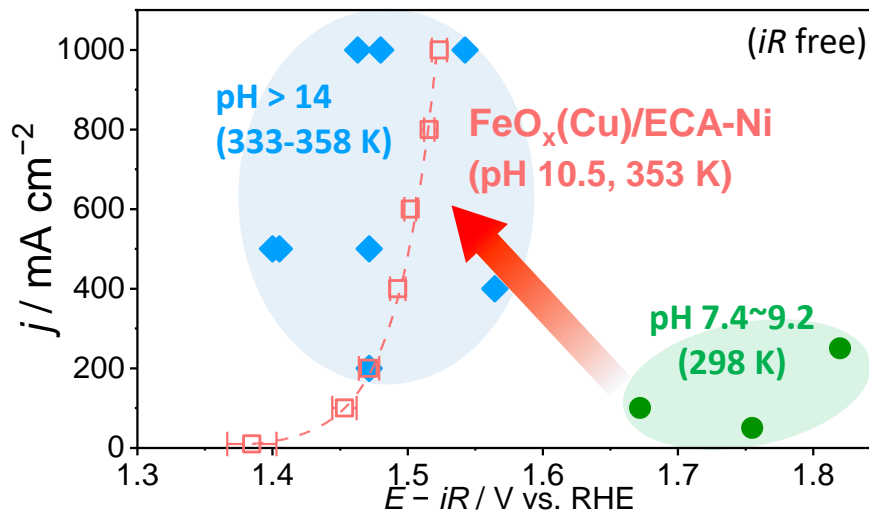
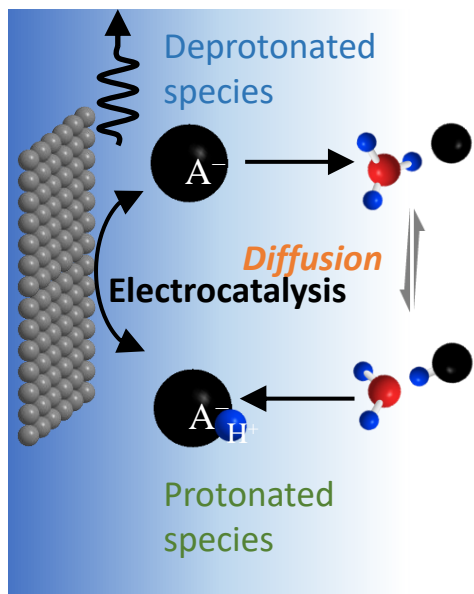


- 汎用元素の複合化された電極
- 弱酸性～弱アルカリ性電解液
- 幅広い温度領域 (25～80 °C程度)
- 高電流密度 (> 100 mA/cm²)

Mn	Fe	Co	Ni
Tc	Ru	Rh	Pd
Re	Os	Ir	Pt



無限の電極材料候補 : ハイスループット実験・理論計算・データ科学を活用して材料探索



高鍋 (東大)

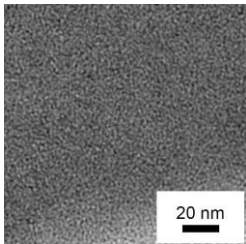
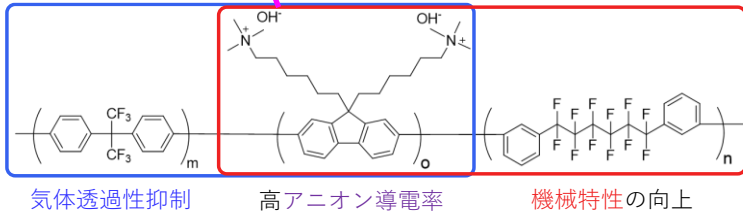
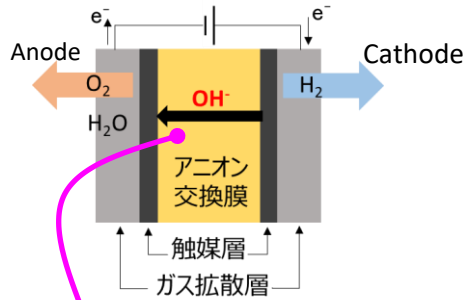
ChemSusChem
2022, 15, e202102294
2021, 14, 1554-1564.

中性
エレクトロライト
エンジニアリング

アルカリ電解に
非貴金属で匹敵
1 A cm⁻²達成

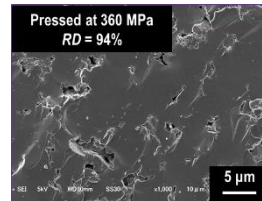
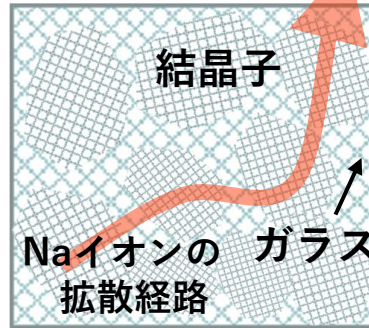
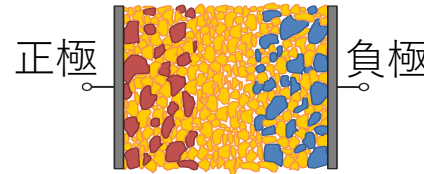
課題3：電気化学材料界面の制御と固体活用デバイス

水電解装置



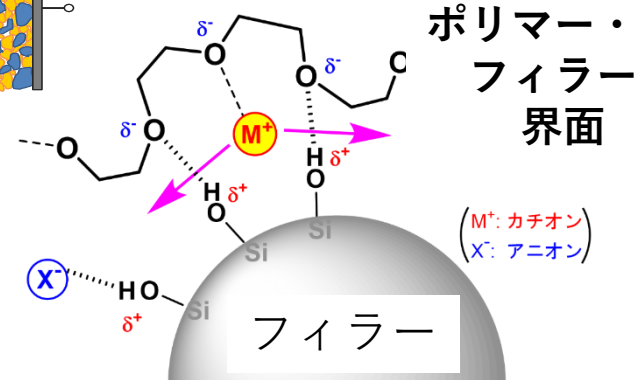
アニオン伝導体材料の開発

全固体電池

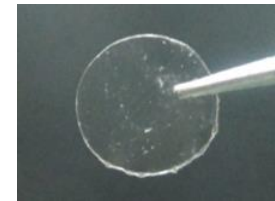


Na₃BS₃ガラスセラミックス

Naイオン伝導体開発



ルイス酸-塩基相互作用 ($\delta^+ - \delta^-$)



ポリマーコンポジット Liイオン伝導体開発

自動・自律実験を活用した高速なモデル界面形成と
最先端計測(界面情報の質・量の確保)

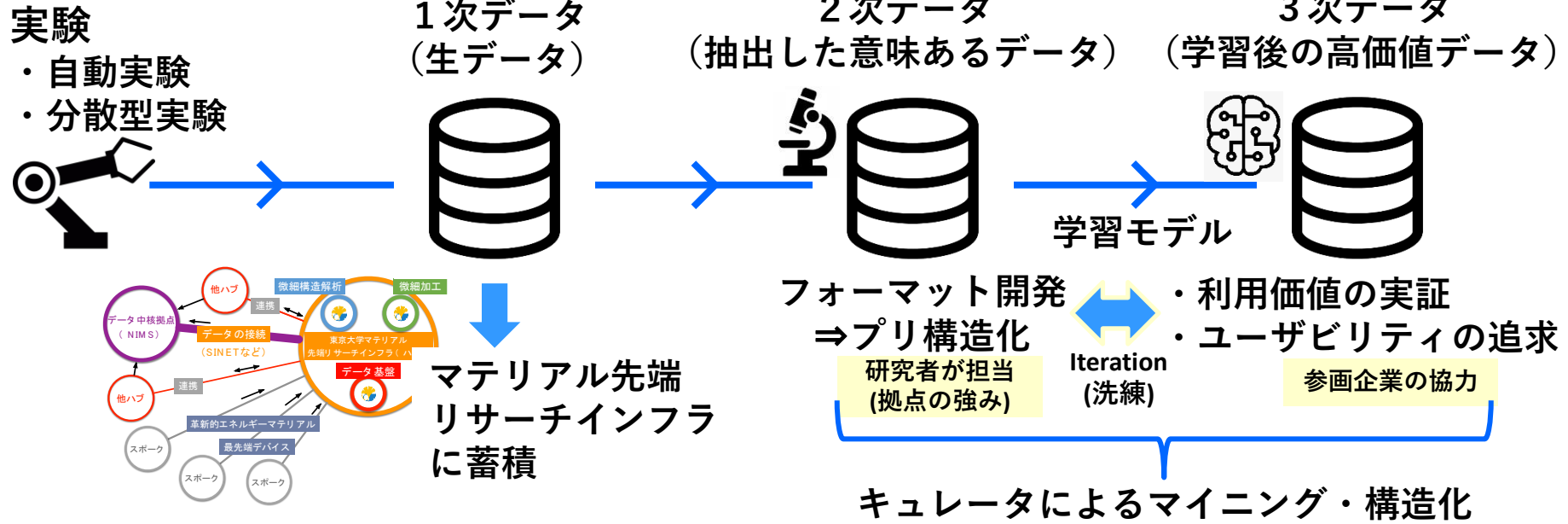
→ 界面イオン伝導メカニズムの解明

高機能イオン伝導固体材料の開発

研究成果の展開と普及活動

東京大学マテリアル先端リサーチインフラハブ
東京大学オープンイノベーション機構 と連携

データのクラスとアクション



オープン&クローズ戦略

【前半】クローズフェーズ

2次データの収集・構造化 ⇒ 3次データ創出により、方法論の開発・実証

方法論開発

実証による信頼獲得

参画メンバー拡大 ⇒ データの広がり

【後半】オープンフェーズ

3次データ・モデルへのアクセスを「リワード」として、賛同者から2次データを収集してオープン (2次+3次)

産業利用・社会貢献

企業メンバとの連携によるフォーマット開発

mdx連携の在り方の創出・提唱

2022

2027

2032

前半フェーズでは方法論開発・実証、後半フェーズでは産業利用・社会貢献