



先進蓄電池研究開発拠点

Advanced Battery Collaboration



国立研究開発法人
物質・材料研究機構
National Institute for Materials Science

先進蓄電池研究開発拠点

先進蓄電池研究開発拠点は、国立研究開発法人 科学技術振興機構（JST）の 共創の場 形成支援プログラム（COI-NEXT）の政策重点分野／環境エネルギー分野【本格型】に 2020 年度（第一期）に採択され、国立研究開発法人 物質・材料研究機構（NIMS）を代表機関として蓄電池技術の発展を強力に推進する研究開発が進められています。

ごあいさつ

共創の場形成支援プログラム（COI-NEXT）政策重点分野・環境エネルギー分野・先進蓄電池研究開発拠点では、リチウムイオン電池や先進リチウム電池そして革新電池に関する研究を進めるとともに、電池研究開発支援プラットフォームとして、シミュレーション技術や先端計測技術や機械学習を組み合わせたプロトコルの開発を実施しています。また、計算科学やデータサイエンスに関しても電池研究開発支援プラットフォームの一部とらえて研究を進めています。

SDGs に資する本プロジェクトのターゲットとして、(1) IoT 化による安心・安全な社会、(2) 輸送・物流革新、(3) クリーンエネルギー利用拡大・防災・減災に資するエネルギー網を実現する蓄電池の開発を設定しています。ターゲットに応じて最適な電池系は異なるため、いくつかの電池系に関する研究を推進しています。

これらの電池系の開発を短期間で行うことができるように電池研究開発支援プラットフォームの構築を推進しています。本プラットフォームを使用することで、バーチャル空間において蓄電池の特性評価や電池設計指針の取得ができるようになり、電池の研究開発に要する期間を短縮できたり、開発コストの削減が可能となります。結果的には日本の電池産業の活性化に大きく貢献できるものと期待しています。

本プロジェクトを開始して3年が経過し、いくつかのプロトコルが利用できる状況になりました。電池開発や材料開発にかかわる研究者の方々に利用いただけるように、本パンフレットにおいてこれまでに開発できた成果を紹介することとしました。積極的に本プラットフォームをご利用頂くことを期待しております。



プロジェクトリーダー
物質・材料研究機構
エネルギー・
環境材料研究センター
招聘研究員
金村 聖志

3つのビジョン



拠点ビジョン(未来のありたい社会像)

先進蓄電池研究開発拠点では、さまざまな用途・性能を持つ次世代蓄電池の研究・開発を通して、クリーンなエネルギーを誰もが利用でき、必要な物資・サービス・情報が地域の隅々まで行き渡る安全・安心な社会（蓄電池が人・モノ・環境・データをつなぐクリーンエネルギー社会）の実現を目指しています。

拠点ビジョン実現に向けたアプローチ

(1) コネクテッドヘルスケア社会や IoT による社会インフラの監視・保守・強靱化を実現する安全性・寿命に優れた高信頼性蓄電池、(2) 輸送・物流に革新をもたらすクリーンな輸送網や移動体・飛翔体・ロボットの電源としての高エネルギー密度・高出力密度蓄電池、そして、(3) 自然エネルギーの出力変動平準化や余剰電力貯蔵のための安価で大型な定置型蓄電池をターゲットに、材料・電極三次元構造・単電池レベルでのマルチスケールな物理化学現象を階層的に理解し、性能・寿命・安全性を高精度に予測するための技術とプロトコルを開発します。この技術によって、産学官によって生まれた高性能な新材料の特性を最大限に利用するための電池構造の設計を行い、社会が求めるさまざまな用途や特性を満たす蓄電池の開発を加速していきます。

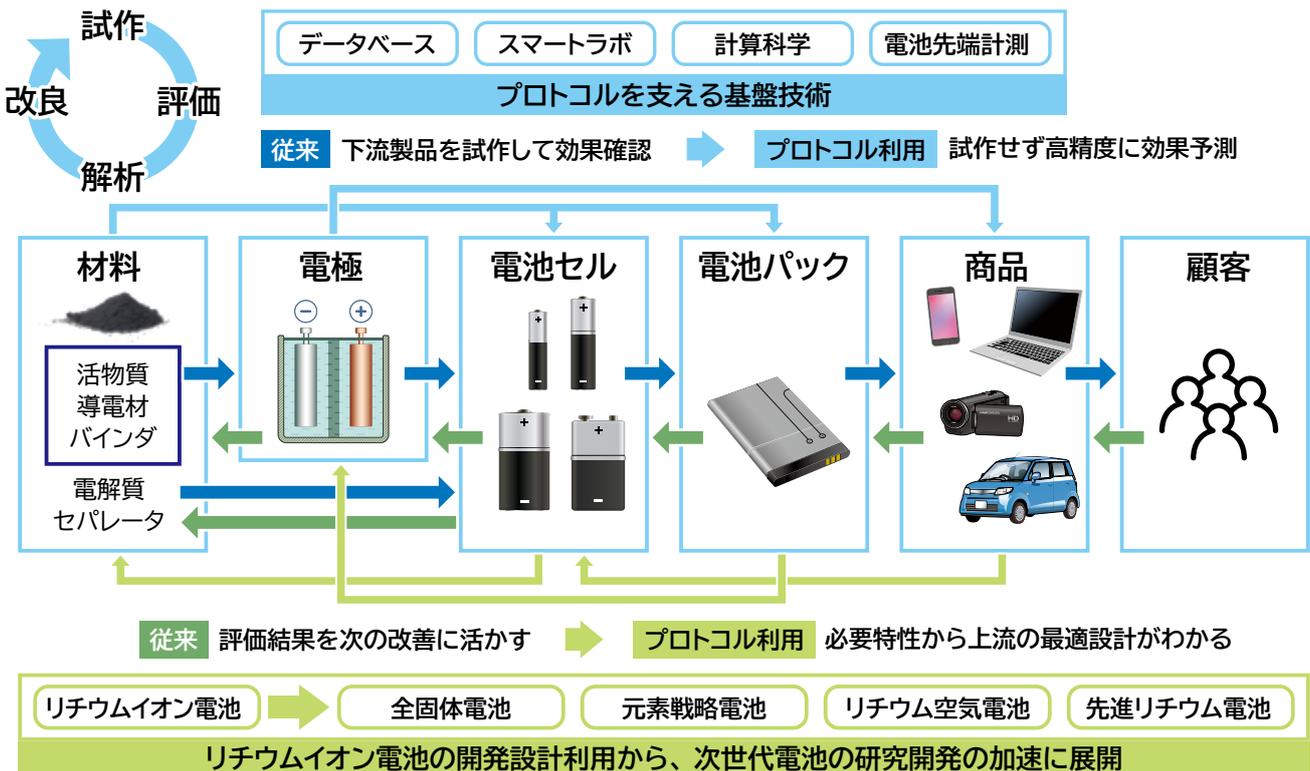
拠点ビジョン実現に向けた拠点の強み

蓄電池の試作・評価・解析のための国内最大規模の共用研究基盤設備を有し、多数の電池・計測・計算科学者が所属する物質・材料研究機構が中核となり、電池材料開発および高度解析技術で世界最高水準の東京大学や京都大学、さらに電池・材料メーカー、ユーザーとなる自動車メーカー・通信関連企業が参画しています。

電池開発・設計プロトコルとは

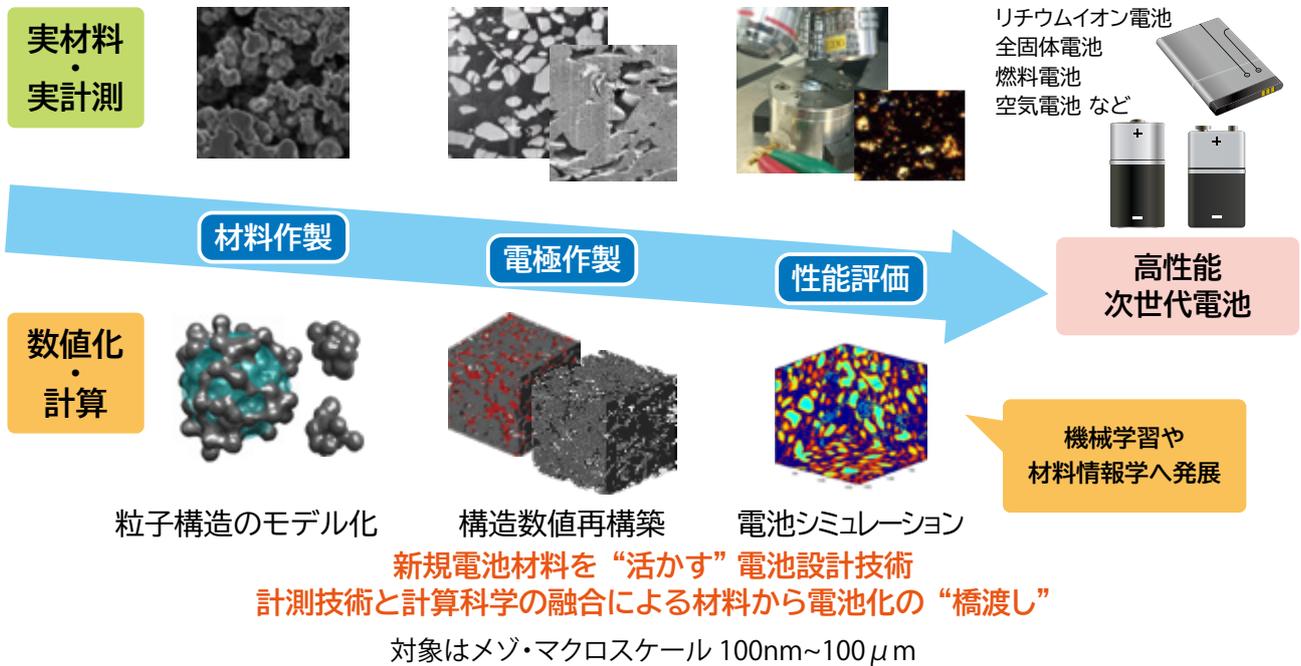
使用する電池構成材料や設計仕様、プロセス条件などの情報を基に、仮想空間上で電極や電池セルを組み立てます。さらに電池に係わるマルチスケールな物理化学現象を反映して、性能・寿命・安全性などの電池特性や、複数の電池からなる電池パックの特性も高精度に予測します。また、社会や機器からの要求特性から、必要となる電池設計や材料物性・性能などの源流技術情報に遡ることも可能です。

言い換えれば、実際に電池を作らず、材料や電極の情報から電池セル・パック性能予測や、機器や電池パック・セルに求められる性能から電極・材料設計指針を得ることができます。



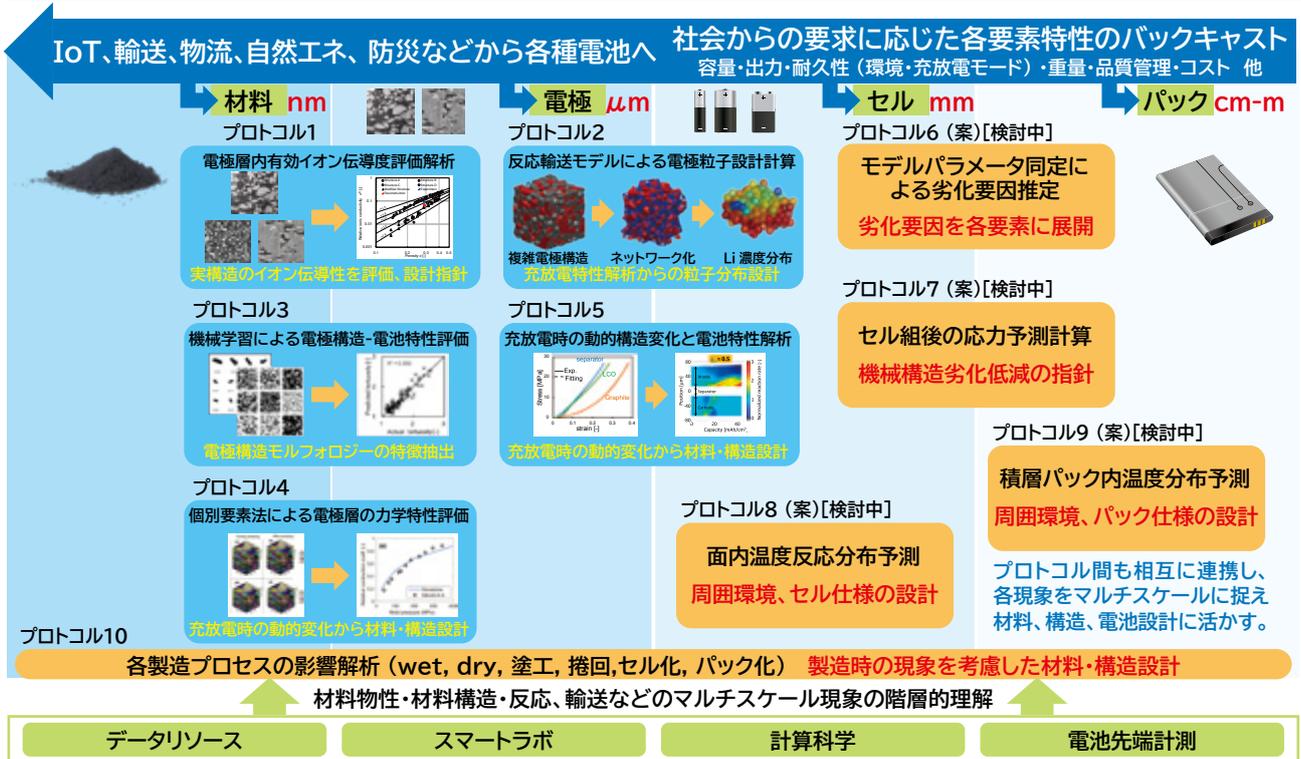
電池開発・設計プロトコル(A) 電極・電池特性の予測

電池内現象解明と設計支援



材料から電極までの各スケールでの実測データを基にしたモデル化とそのモデルを利用した特性シミュレーション、さらには、それらの機械学習を通じた電池性能予測や、設計提案を目指します。

蓄電池研究開発のプラットフォーム構築

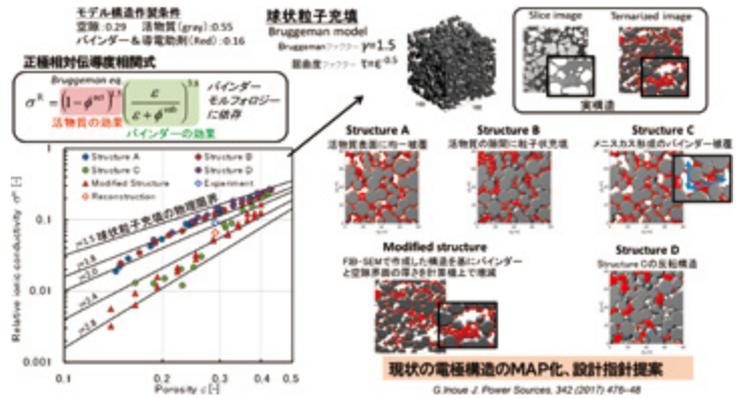


電池解析・設計開発プロトコルにより材料開発・電池研究開発・社会実装を大幅に加速

モデル化やシミュレーション技術を複数のプロトコルに分割し、それぞれに必要な測定、分析を行いながら、各プロトコルを連結させ、セルレベルからパッケレベルまでの電池特性予測を目指します。

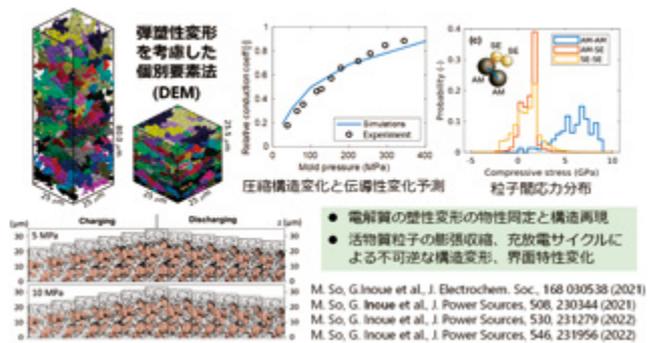
【使用例1】多孔質電極内の有効イオン伝導度

材料から電極までの各スケールでの実測データを基にしたモデル化とそのモデルを利用した特性シミュレーション、さらには、それらの機械学習を通じた電池性能予測や、設計提案を目指します。



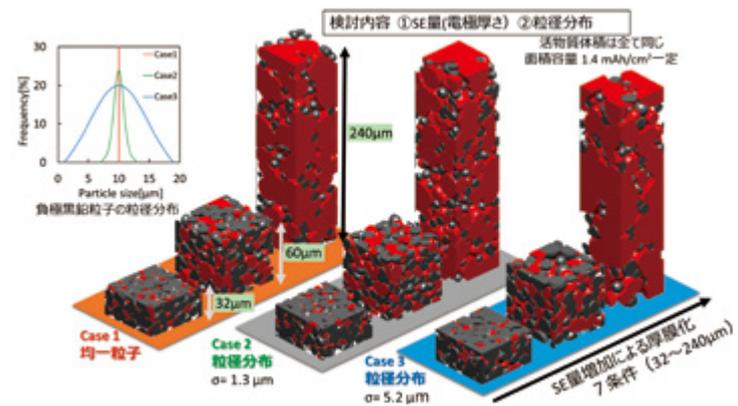
【使用例2】電極層の構造変形解析

多孔質構造を有する電池用電極において、圧縮成形時や充放電時の体積膨張収縮を考えた構造変形を予測します。粒子界面の反応界面積変化や伝導性変化の予測に本知見をフィードバックします。



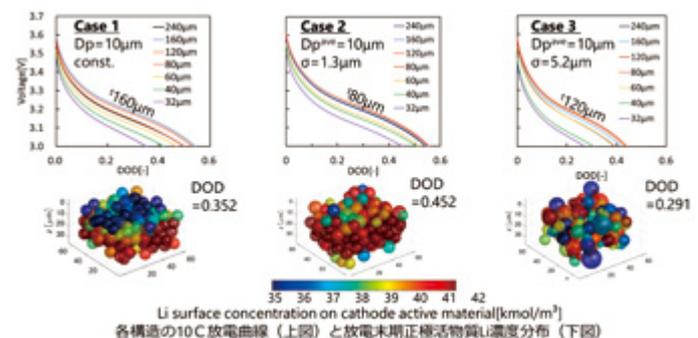
【使用例3】モデル電極構造の計算対象と条件

多孔質構造中の活物質粒子の形状や空隙の連結度などのパラメータをシミュレーションに取り込むことで、実電極に限りなく近いモデルを構築します。



【使用例4】粒径分布と電極厚さが放電特性に与える影響

反応分布を計算することで、電極の厚さや活物質粒子の大きさが電極の電気化学特性に与える影響を予測します。



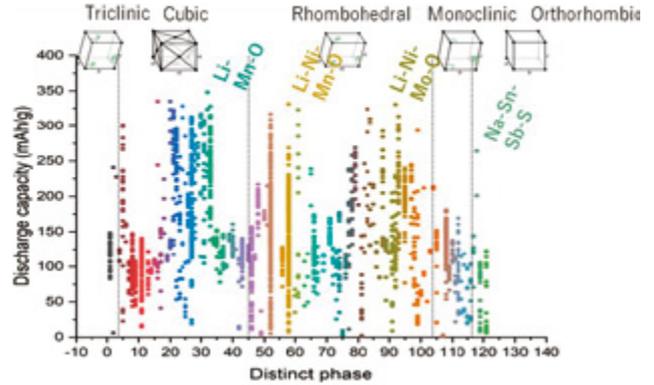
電池開発・設計プロトコル(B) 性能予測に有効な基盤技術

データベース

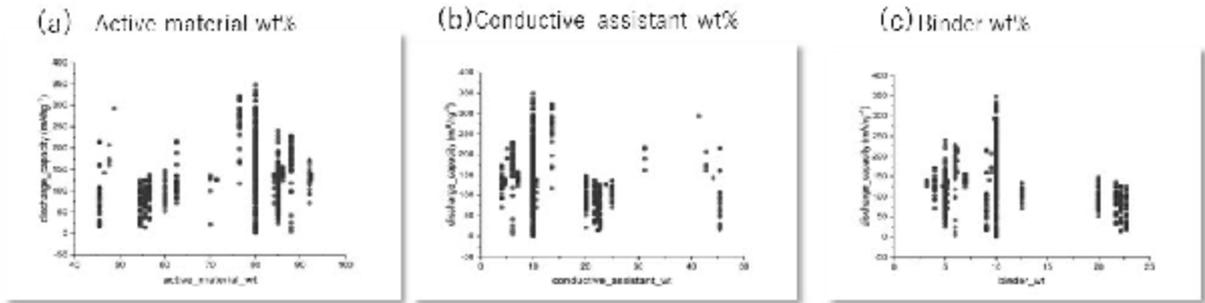
正極材料に関する200件/年を超える文献から、セラミックスや複合材料をはじめ実用材料を対象に、材料合成法や基本物性、電池構造や構成、充放電特性などの情報を収集しています。

また、化学式や結晶構造等の記述標準化により、実績ある物質データベースとの連携も可能です。物質から材料、電池まで統合的に扱うことができる画期的な電池材料データベースで、新材料の探索に有効です。

2023年にリリース、毎年更新する予定です。



正極材料の結晶構造システム別の放電容量

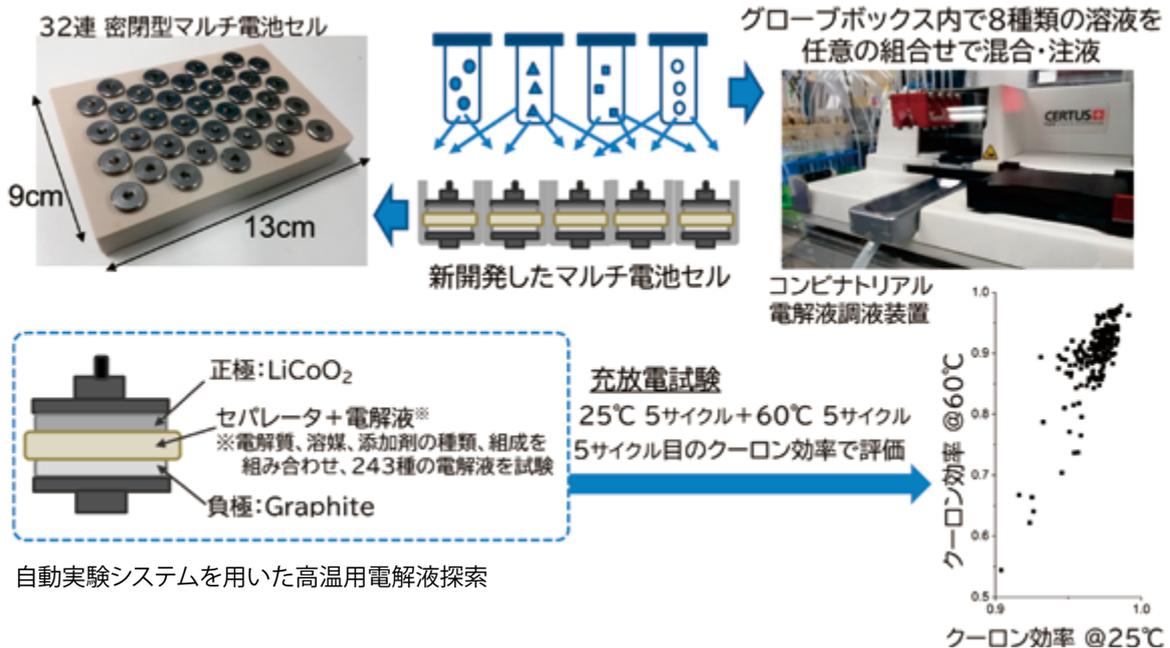


放電容量vs.正極材料の構成

スマートラボ

ロボット実験と機械学習を高度に連携した電解液の自動探索システムで、人を介することなく、1日で1,000水準の材料探索が可能です。また、独自開発の密閉型マルチ電気化学セルを用いることにより、1週間で200水準の電解液の電池性能評価に対応でき、高温耐久電解液などの開発への活用も期待されます。

さらに、2×3cmのラミネート型単層電極セルを1日60セル作成可能な装置も構築しています。

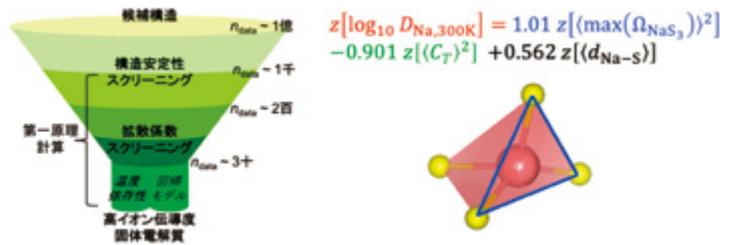


自動実験システムを用いた高温用電解液探索

計算科学

分子動力学法による自己拡散係数の直接計算をハイスループット化。材料（イオン配置）の安定性を高効率で判断できるコードの開発、自己拡散係数の短時間診断ステージ導入などにより、自己拡散係数データベースの構築や有望な固体電解質候補の探索をより迅速に実行することが可能です。

スーパーコンピュータ「富岳」の計算速度、多数ノード性という特徴を活かしたハイスループットフローとなっており、他材料への展開や材料パラメータ空間の拡大にも有効です。



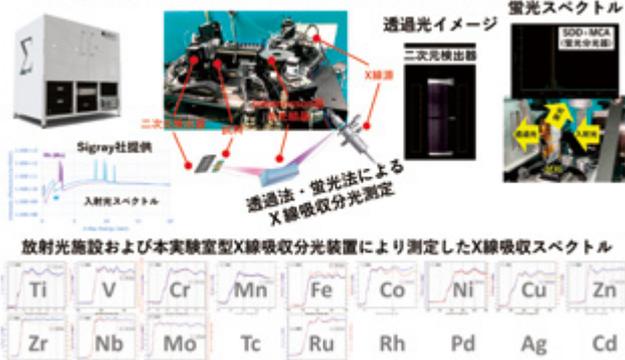
高イオン伝導度固体電解質探索のためのハイスループットスクリーニングフローと、計算データをもとに得られた Na イオン室温自己拡散係数の回帰式。

電池先端計測

高輝度連続 X 線を備えた実験室型 X 線吸収分光装置を基盤として、光学系・測定条件の最適化を図り、Ti ~ Zn の 3d 遷移金属および Zr、Nb、Mo、Ru などの一部の 4d 遷移金属を対象とした K 吸収端について放射光施設と比肩し得るスペクトルが得られています。さらに、測定可能な元素の拡大に向けた取り組みを推進しています。

また、グローブボックスに設置した原子間力顕微鏡とナノインデントから成るナノ力学計測装置では、コンポジット電極断面のナノ形状とヤング率分布を定量的に計測することが可能です。このほか、断熱型暴走反応熱量計による材料・電池の自己発熱特性、硬 X 線光電子分光法による電極反応その場解析などの評価技術の開発も進めています。

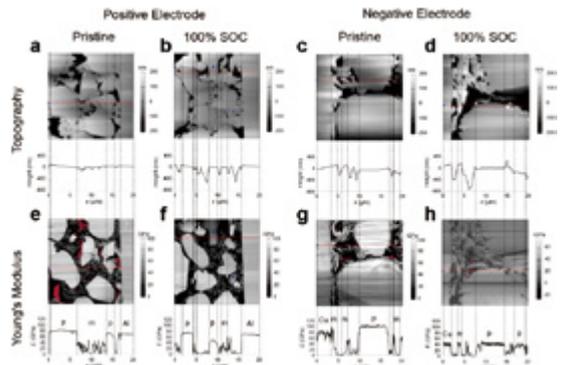
■ X線吸収分光法 実験室にて2.4-20 KeV領域でのX線吸収分光測定が可能



(上段)実験室型X線吸収分光装置
(下段)チタンからルテニウムまでの3dおよび4d遷移金属を対象としたK吸収端X線吸収スペクトル

■ナノ力学特性計測のためのAFM測定システム

T. Masuda, et al., J. Power Sources, 413 (2019) 29.



振幅変調-周波数変調 (AM-FM) モード原子間力顕微鏡によるシリコン負極へのリチウム挿入過程のオペランド観察

SPring-8の100keVを超える高エネルギーの並行光により、電池セルの内部構造の動的変化を測定できます。また、過充電、釘刺し、圧壊などを含む、様々な試験中の構造観察にも対応しています。

■オペランドX線CTイメージング装置



SPring-8に設置された全電池のオペランドX線CTイメージング装置と、不安全性現象後の電池構造変化

アクセス



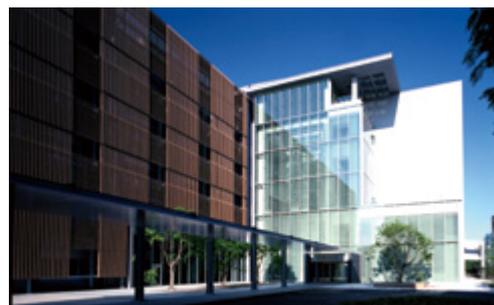
つくば駅からのアクセス NIMS 定期便/バス乗り場のご案内



- TX「つくば駅」下車後、A3 出口より出て「企業バス乗り場 B」から NIMS の定期便バスにご乗車いただけます。
- TX「つくば駅」下車後、A3 出口より出てつくばバスターミナル 4 番乗り場から関東鉄道バス「荒川沖駅行」乗車、「物質材料研究機構（並木一丁目）」下車、徒歩 1 分。

国立研究開発法人 物質・材料研究機構 先進蓄電池研究開発拠点事務局

〒305-0044 茨城県つくば市並木 1-1
 TEL : 029-860-4960
 E-mail : ABC-info@nims.go.jp
<https://www.nims.go.jp/ABC/index.html>



国立研究開発法人 物質・材料研究機構
 National Institute for Materials Science



GREEN



先進蓄電池研究開発拠点
 Advanced Battery Collaboration

