先端国際共同研究推進事業
2024 年度採択
「Top のための ASPIRE」
エネルギー分野

2024 年度

年次報告書（公開版）

研究課題名	ナノ/マイクロ構造を含む無機パワーストレージ材料インフォマティクスを実現する国際データ解析プラットフォームの構築
日本側研究代表者	平山 雅章 東京科学大学 教授
相手側研究代表者	・Yiguang Ju, Professor, Princeton University ・Andrei Fedorov, Professor, Georgia Institute of Technology ・Michael Gordon, Professor, University of California, Santa Barbara ・Laurent Antoni, Senior Fellow Hydrogen, Commission for Atomic and Alternative Energies ・Michael De Volder, Professor, University of Cambridge
研究期間	2024 年 12 月 1 日～2030 年 3 月 31 日

1.　研究成果の概要

① 研究構想にかかる成果

本研究は、ナノ/マイクロ構造を含む無機パワーストレージ材料インフォマティクスを実現する国際データ解析プラットフォームを本研究期間内に構築し、継続的にデータベースおよび人的ネットワークを持続的に構築し続けることで、ナノ/マイクロスケール情報を含んだ材料インフォマティクスによる高機能パワーストレージ材料を創出することを目的とする。2024 年度は、適切に知的財産を管理し、協調および競争領域を切り分けた国際共同研究の枠組みを作ることを目的として、推し進めた。実施内容と成果を以下に報告する。

キックオフ会議の開催：2024 年 12 月 13 日から 14 日の 2 日間、甲府市において対面で開催した。海外 PI から De Volder（ケンブリッジ大学）、Ju（プリンストン大学）、Gordon（カリフォルニア大学）、Fedorov（ジョージア工科大学）の 4 名が参加し、日本側からは各研究分野リーダー（平山、大友、伊原、末包）を含む 7 名が参加した。本プロジェクトの概要・目的の共有、国際データ解析プラットフォーム構築に向けて、データベースフォーマット、データ入力方法、データ利活用に向けたシステム開発の方針、国際間研究契約締結プロセスを意見交換、課題を抽出できた。

- 研究計画：リチウムイオン電池、全固体電池、燃料電池、新規デバイスに関して、合成、構造、物性の実測データ、計算・シミュレーションデータを融合して、データベース化を目指す国際共同研究計画の重要性を再確認し、推し進めることで意見一致した。国際共同研究契約後に迅速に研究を開始できるように各研究グループ内での予備検討を進めることとした。2025 年度早期に個別検討の結果を PI（研究代表者）が取りまとめて、本プロジェクトの目的・方向性との整合性を議論し、共同研究開始の準備をさらに推し進める計画とした。
- 共同研究範囲設定の課題：本研究プロジェクトの趣旨である国際ネットワーク構築、人材交流に関して、改めて海外 PI から強い賛同を得るとともに、海外にはない日本独自の良い制度であるという評価を得た。各機関内における制約を意識しつつ、実施可能な国際共同研究の具体案を議論した。本チームが所有する既存データの活用（公開・共有範囲）、新たなデータの効率的な取得などで独自性や有用性を高める方向を目指すことで一致し、生成 AI を活用したデータベース開発を進めることとした。
-

② 国際ネットワーク構築・拡大／国際頭脳循環の促進に資する若手研究者の人材育成に関する実施内容・成果

2024 年度は、研究契約前であるために研究推進のための派遣・招聘は実施しなかった。一方、キックオフ会議（12 月）に先立ち、東京科学大学の学生を短期間海外派遣した。そのうえで契約を前提とした 2025 年度の派遣計画を検討した。ネットワーク構築・拡大に関連する 2025 年度事業計画を定めた。

- 学生の海外派遣実績：採択通知後、キックオフ会議までの 10-11 月の期間に、東京科学大学の博士学生 13 名を 1 週間程度海外派遣し、将来的に創出されうる融合的な研究テーマ（新しい学際的研究テーマ）の提案を求めた。派遣先の内訳はプリンストン大学（4 名）、カリフォルニア大学サンタバーバラ校（4 名）、フランス原子力・代替エネルギー庁（3 名）、ジョージア工科大学（2 名）。12 月に報告会を実施し、実施可能研究内容に関する意見交換に活かした。
- 海外派遣・招聘の進め方：キックオフ会議（12 月）において、海外 PI 側は共同研究同様に、若手研究者派遣・招聘にも極めて協力的であり、できる限り進める意向が示された。特に日本側からの研究者受け入れの支障はないことを確認できた。海外からの招聘に関する課題についても意見交換できた。
- ネットワーク構築・拡大に関連する事業計画：本 ASPIRE プロジェクト内研究者（博士・修士・学部学生）の交流計画としては、2025 年 12 月に対面で国内・海外 PI および若手研究者が一同に介して、

シンポジウムを開催することとした。グループ間交流から異なる材料・デバイスの研究者と議論できる若手研究者の育成を図る。ASPIRE エネルギー領域としては、ASPIRE で支援されている大久保課題（トップ枠）・大野課題（次世代枠）と協働して、固体イオニクスセミナー開催（2025 年 8 月）、MRM (Materials Research Meeting)内シンポジウム開催（2025 年 12 月）を実施することとした。

2. 各研究テーマの実施報告（今年度）

2024 年度、2025 年度は主に研究分野内での国際共同研究を実施し、実測および計算データの収集とデータベース開発を推し進めることとしている。2024 年度成果を以下に示す。

＜研究分野 A＞

固体/液体リチウムイオン電池関連材料データ取得・データベース化

東京科学大学（平山・荒井）が有する物質合成、散乱法・顕微鏡法を用いた高度解析の技術と、ケンブリッジ大学（De Volder）が有する独自のプロコトルを用いた電気化学計測およびナノ/マイクロ構造体作製技術とを用いて、2025 年度からリチウムイオン電池のナノ～マイクロ～ミリスケールにおける構造および電気化学現象の実測を開始することとし、2024 年度は研究内容および派遣・招聘計画の調整を進めることができた。

＜研究分野 B＞

水電解セル/水素燃料電池関連材料データ取得・データベース化

2024 年度は、SOFC/SOEC の技術経済性分析に用いるための性能と経済性に関するデータの構造化を進めた。新デバイス・システムの創成に関わる予測的/先行的技術経済性分析をコストエンジニアリングと称し、今後の国際連携に適用する予定である。今年度は、SOFC の発電データに基づく発電のモデル化とコストデータの構築を行った。この成果は、次年度の水素製造や二酸化炭素還元を含むコストエンジニアリング推進の基礎として活用される。さらに海外連携機関との意見交換会を開催し、欠陥化学に基づく水素生成反応の検討について意見交換を行うことで、2025 年度の学生派遣の国際研究のネットワークを構築した。

＜研究分野 C＞

次世代蓄電デバイス関連材料データ取得・データベース化

データ収集の方法の詳細、研究分野 C として必要となるデータベースとはどのようなものなのか、などの大枠について意見交換し、「データフォーマット検討・構築 研究分野」や他の研究分野との今後の連携について大枠の合意に至った。本プロジェクトにて次世代蓄電デバイスの代表例として掲げている CASB のグループ内論文を、研究分野 E（データフォーマット検討・構築 Gr）に試験的に提供した。さらに、これらの論文を使って試験的にチューニングした生成 AI-1 の"質"に関する議論を開始した。

＜研究分野 D＞

HPC（High Performance computing）シミュレーション関連材料データ取得・データベース化

本研究分野では、各共同研究から公表された論文、学会要旨、公表可能な範囲で修士論文や博士論文などの学位論文に加え、失敗し、論文や学会発表のデータにならず、これまでであれば公表されることなく個研究者の PC にのみ蓄積されていたデータについても、できる限り数値情報を含むドキュメントとして、データフォーマット研究チームに提供する。本年度は、若手交流を進めるための個別研究テーマ、実施計画について議論を行った。さらにデータ収集の方法については、個々データの特性や秘密保持の観点、所属機関の諸規則などに照らし合わせ、多角的にデータ収集の可否と手法について意見交換を行った。データ収集の手法やフォーマットについて参画しているメンバー間でのおおよその合意が得られたが、「データフォーマット検討・構築 研究分野」とも継続的に検討していくこととした。

＜研究分野 E＞

データフォーマット検討・構築

本研究分野では、高速化、かつ、多様な知識をデータベース化する手法として、生成 AI を全面的に活用するデータ入力、データベース化手法に挑戦する。本事業では、2 種類の生成 AI（生成 AI-1、生成 AI-2）をチューニング開発する方針を決定した。数値情報を含めた情報を独自に学習させることで、共通の一次データベースとすることを目指す。2024 年度は、2 種類の生成 AI のチューニング開発に向けて施策やテストなどを行い、本プロジェクトの主要メンバーが 12 月に甲府にて対面で集まり、各グループのグループリーダーや PI と相談し、来年度以降のデータ収集の方法について協議した。その結果、2025 年度以降のデータ収集の方法やデータの取り扱い、具体的な進め方について合意した。

3．研究実施体制

研究分野	中心となる研究者氏名	所属機関・部署・役職名
研究分野A 固体/液体リチウムイオン電池	平山　雅章 荒井　創 Michael De Volder Yiguang Ju Laurent Antoni	東京科学大学・物質理工学院・教授 東京科学大学・物質理工学院・教授 ケンブリッジ大学・工学部・教授 プリンストン大学・機械・航空宇宙工学専攻・教授 原子力・代替エネルギー庁・新エネルギー技術研究部門・シニアフェロー
研究分野B 水電解セル/水素燃料電池	大友　順一郎 Laurent Antoni Andrei Fedorov Michael Gordon	東京科学大学・環境・社会理工学院・教授 原子力・代替エネルギー庁・新エネルギー技術研究部門・シニアフェロー ジョージア工科大学・機械工学科・教授 カリフォルニア大学サンタバーバラ校・化学工学専攻・教授
研究分野C 次世代蓄電デバイス	伊原　学 多湖　輝興 大友　順一郎 Yiguang Ju Michael Gordon	東京科学大学・物質理工学院・教授 東京科学大学・物質理工学院・教授 東京科学大学・環境・社会理工学院・教授 プリンストン大学・機械・航空宇宙工学専攻・教授 カリフォルニア大学サンタバーバラ校・化学工学専攻・教授
研究分野D HPCシミュレーション	末包　哲也 Sergei Manzhos 平山　雅章 荒井　創 篠田　浩一 店橋　護 Yiguang Ju Andrei Fedorov	東京科学大学・工学院・教授 東京科学大学・物質理工学院・准教授 東京科学大学・物質理工学院・教授 東京科学大学・物質理工学院・教授 東京科学大学・情報理工学院・教授 東京科学大学・工学院・教授 プリンストン大学・機械・航空宇宙工学専攻・教授 ジョージア工科大学・機械工学科・教授
研究分野E データフォーマット	伊原　学 小野　功 Sergei Manzhos	東京科学大学・物質理工学院・教授 東京科学大学・情報理工学院・教授 東京科学大学・物質理工学院・准教授

4．代表的な業績（原著論文、プレスリリース、表彰など）

原著論文

[1] Steven W. Thompson, Thiago R. Guimarães, Kenta Watanabe, Masaaki Hirayama,Per B. Zetterlund, Encapsulation of $LiCoO_2$ particles with lithium containing polymer for solid state lithium-ion battery cathodes, Polymer, 324, 128255, 2025