

未来社会創造事業（探索加速型）

「共通基盤」領域

年次報告書（本格研究）

令和 6 年度採択研究開発代表者

[研究開発代表者名:井上 元]

[九州大学大学院 工学研究院 化学工学部門・教授]

[研究開発課題名:マルチスケール計測・計算技術の融合による
高スループットデバイス開発支援プラットフォーム]

実施期間：令和 6 年 4 月 1 日～令和 7 年 3 月 31 日

§1. 研究開発実施体制

- (1) 「研究統括・内部現象計算 メゾスケール計算」グループ(九州大学)
 - ① 研究開発代表者 井上 元(九州大学大学院 工学研究院・教授)
 - ② 研究項目:全体総括, メゾスケール内部現象計算の高速化と大規模化, 最適設計への展開
- (2) 「先端計測・高度計測 X線 CTXAFS の技術開発」グループ(東北大学)
 - ① 主たる共同研究者:雨澤 浩史 (東北大学 多元物質科学研究所・教授)
 - ② 研究項目:5D X線 CT-XAFS 計測の高速化とマルチスケール計測の手法確立
- (3) 「先端計測・高度計測 X線 CT の技術開発」グループ(立命館大学)
 - ① 主たる共同研究者:折笠 有基 (立命館大学 生命科学部・教授)
 - ② 研究項目:X線 CT による電極層の動的変形計測と粒子形態の同時取得の確立
- (4) 「先端計測・高度計測 放射光設備における計測高度化」グループ(高輝度光科学研究センター)
 - ① 主たる共同研究者:関澤 央輝 (高輝度光科学研究センター 放射光利用研究基盤センター・主幹研究員)
 - ② 研究項目:放射光設備における治具開発や計測高度化, 高速計測の手法検討
- (5) 「データ処理 3D 構造情報からの特徴量抽出」グループ(九州大学)
 - ① 主たる共同研究者:野下 浩司 (九州大学大学院 理学研究院・助教)
 - ② 研究項目:パーシステントホモロジー解析による3D 構造からの特徴抽出技術の構築
- (6) 「データ処理 ビッグデータを対象にした高速演算」グループ(国立情報学研究所)
 - ① 主たる共同研究者:佐藤 いまり (国立情報学研究所・教授)
 - ② 研究項目:X線 CTXAFS 計測データの高速再構成・取得情報高精度化の技術構築
- (7) 「データ処理 多様な計測手法によるデータ拡充」グループ(東京農工大学)
 - ① 主たる共同研究者:金 尚弘 (東京農工大学 大学院工学研究院・准教授)
 - ② 研究項目:モデルベース開発への各要素技術の組み込みと高速連携の技術構築
- (8) 「内部現象計算 複雑構造内のミクロスケール反応輸送解析」グループ(京都大学)
 - ① 主たる共同研究者:岩井 裕 (京都大学大学院 工学研究科・教授)
 - ② 研究項目:粒子内部の分布計算の高速化とマクロ特性取得の技術構築

(9)「自動最適設計 検証・設計結果の評価」グループ(東京大学)

- ① 主たる共同研究者:長藤 圭介 (東京大学大学院 工学系研究科・教授)
- ② 研究項目:緩和時間応答計測による時空間情報取得とその評価手法の確立

(10)「自動最適設計 材料試作と評価検証」グループ(北海道大学)

- ① 主たる共同研究者:松井 雅樹 (北海道大学大学院 理学研究院・教授)
- ② 研究項目:最適設計情報を受けて試作品作製, 電気化学評価の実施

§2. 研究開発成果の概要

二次電池等の各種デバイス・システム開発のリードタイム短縮を目指し,「先端計測・高度計測」,「データ処理」,「内部現象計算」,「自動最適設計」の各要素技術を高速かつ連続的に連結させるフィードバックループを構築することを目的とする. 各スケールの現象理解から最適な構造設計や指針立案を行うことでサンプル試作や手戻りを無くし, 1/160 のリードタイム短縮効果の達成を目指す. 2024 年度は各要素技術の高度化を推進した. 各項目の詳細を下記に記す.

(1)「先端計測・高度計測」(東北大学, 立命館大学, 高輝度光科学研究センター)

X 線 CTXAFS を用いて電極全体とその内部粒子の反応分布計測を同期させる手法を構築し, また X 線 CT により電極構造の動的変化と粒子形態の相関評価が可能となった. これら計測において計測治具や設備の高度化, また新規のデータ処理を適用し, 計測データ取得を高速化した.

(2)「データ処理」(九州大学, 情報学研究所, 東京農工大学)

(1)の X 線 CTXAFS を用いた電極計測データに対して三次元構築の高速化や, パーシステントホモロジー解析による粒子特徴抽出の技術を構築し, また各要素技術をモデルベース開発として組み込むスキーム構築について検討を進めた.

(3)「内部現象計算」(九州大学, 京都大学)

機械学習手法を用いて電極層内のメゾスケールの反応輸送計算を高速に行う手法を構築した. また粒子内部の物質輸送を計算し, マクロな輸送特性を推定する手法を構築した. 以上より, (2)で得られる電極構造や粒子構造のデータを用いた計算が可能となった.

(4)「自動最適設計」(東京大学, 北海道大学, 九州大学)

緩和時間応答計測による時空間情報取得とその評価手法の確立を進め, 自動最適化により提案された理想サンプルの有効性と妥当性の検証の道筋を得た. また本研究の効果検証のために, 形状が異なる正極粒子の作製技術を構築した.

【代表的な原著論文情報】

1. Su Huang, Yuta Kimura, Takashi Nakamura, Nozomu Ishiguro, Oki Sekizawa, Kiyofumi Nitta, Tomoya Uruga, Tomonari Takeuchi, Toyoki Okumura, Mizuki Tada, Yoshiharu Uchimoto, Koji Amezawa, “Protracted Relaxation Dynamics of Lithium

Heterogeneity in Solid-State Battery Electrodes”, *J. Phys. Chem. C*, **128**(15), 6213-6221 (2024)

2. Magnus So, Takeru Yano, Agnesia Permatasari, Van Lap Nguyen, Gen Inoue, “Role of Pressure and Expansion on the Degradation in Solid-State Silicon Batteries: Implementing Electrochemistry in Particle Dynamics”, *Advanced Functional Materials*, 2423877 (2025)
3. Akihisa Tanaka, Gen Inoue, Keisuke Nagato, “Comparative study of heterogeneous and homogeneous catalyst-layer models of PEM fuel cells”, *J. Power Sources*, **638**, 236612 (2025)