

# ハイスループット電気化学評価システム

Keywords: 蓄電池用電解液、探索アルゴリズム

二次電池材料グループ

松田 翔一

MATSUDA.Shoichi@nims.go.jp | [https://samurai.nims.go.jp/profiles/matsuda\\_shoichi](https://samurai.nims.go.jp/profiles/matsuda_shoichi)



## 研究の背景

- 蓄電デバイスの高エネルギー密度化に対する高い社会的需要
- 多成分系におけるデータ駆動型の材料探索
- 試行錯誤的アプローチによる網羅的検証の限界

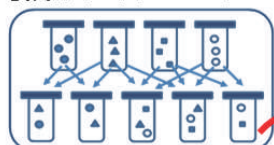
## 研究の狙い

- ハイスループット電気化学評価システムの構築
- オートメーション操作による均一性の高い大量のデータセットの取得
- 探索アルゴリズムの活用による高機能電解液組成の高速発見

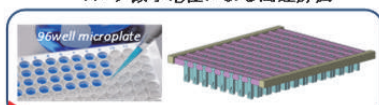
### 最先端研究トピックス

#### ■ ハイスループット電池特性評価システム

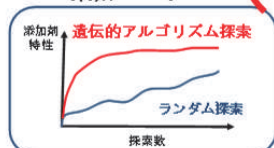
##### 電解液ライブラリーの高速合成



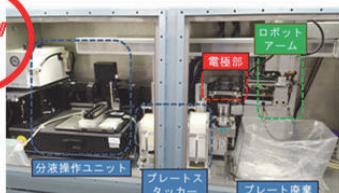
##### マルチ微小電極による高速評価



##### 探索アルゴリズム

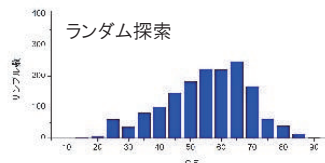


連動制御  
自動化

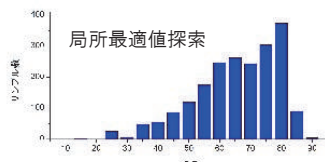


#### ■ 探索アルゴリズムの活用による蓄電材料の高速発見

##### ランダム探索



##### 局所最適値探索

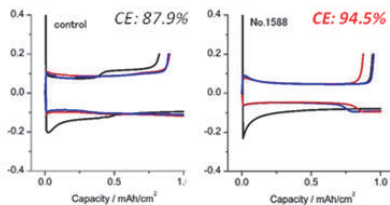


#### ■ リチウム負極用高機能電解液の探索

16種類の化合物から5種類を選定し、電解液を作成

5種類の化合物から構成される高い蓄電池特性を示す電解液組成を発見

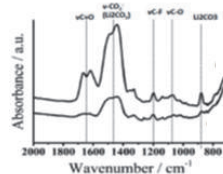
1成分でも除くとその効果は大きく低減する  
→ 協調効果の存在を示唆



従来電解液

新規電解液

クーロン効率向上要因についての検討  
表面被膜の組成分析 (XPS, FTIR)



### まとめ

- 探索スループット 400 sample/dayの達成
- 1週間以上のオートメーション運転の実現
- 金属リチウム電極用の新規電解液発見

### 実用化への目標

- 様々の蓄電池材料系への展開
- 蓄電池以外の電気化学系への本システムの適用
- データ科学的手法による高機能材料組成の予測