イオン伝導体を用いたリチウム同位体分離条件に対する数値解析

Numerical analysis for the condition of Lithium isotope separation using ionic conductor

*小林 恵太[1], 星野 毅[1]
[1]量研

リチウムイオン伝導体を分離膜としてリチウム含有溶液からリチウム回収を行うことにより、リチウム６とリチウム７の同位体分離を行うことが可能になる。この時、溶液中に含まれるプロトン、ナトリウム等の一価イオンが回収効率の阻害要因となる。今回、マテリアルインフォマティクス的な手法により、表面が他元素で交換されにくいイオン伝導体の解析、及び探索を行った。

キーワード： リチウム 6 濃縮、リチウム同位体分離、リチウムイオン伝導体、第一原理計算、トリチウム増殖材料

1. 緒言

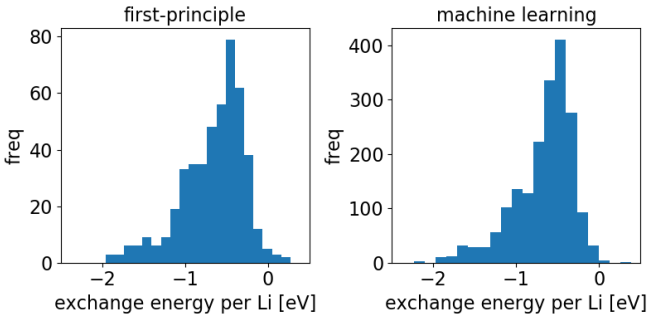
リチウムイオン伝導体を分離膜として用い、Li 含有溶液から ^{6}Li と ^{7}Li の同位体分離を行うことが可能となるが[1]、リチウム回収効率は Li 含有溶液中に含まれるプロトン(H)やナトリウム(Na)等の他元素の影響を受ける。このため、効率よく同位体分離を行うためには、リチウム吸着選択性の高いリチウムイオン伝導体が望まれる。本発表では古典力場＋第一原理計算と機械学習を組み合わせた、マテリアルインフォマティクス的な手法により､イオン伝導体表面が H や Na に交換されにくいイオン伝導体の探索を行った。

2. 手法

第一原理計算データーベース Material Project から Li,O を含有する 3, 4 元系化合物、約 9000 の結晶構造を対象とした｡約 9000 件の中からリチウムイオン伝導体として機能し得る物質をスクリーニングする必要がある。ここでは、古典力場により Li イオン伝導における活性化エネルギーの簡易計算を実行し、約 9000 件の中から高い活性化エネルギー、分解エネルギーを持つものを除外した 2386 構造を評価の対象とした。次に、2386 構造から 469 構造をランダムに選び出し、第一原理計算により、H,Na に関するイオン交換エネルギーの計算を行った。イオン交換エネルギーを目的変数とし、電気陰性度、原子半径、動径分布関数等を記述子とした重回帰分析を行い、イオン交換性能の予測モデルを機械学習により作成した。

3. 結論

第一原理計算データーから Li-H(Na)イオン交換エネルギーに対する予測モデルを構築した。交差検証の結果 Li-H、Li-Na 交換予測モデルの R^2 決定係数は約 0.75､0.65 となり予測能のあるモデル構築が可能であることを確かめた。また、予測モデルから未計算 1917 構造に対するイオン交換エネルギーを算出したところ、第一原理計算データーの分布を再現していることを確認した(右図)。



左図:第一原理計算により計算した 469 構造に対する Li-H イオン交換エネルギーとその頻度.。右図：未計算 1917 構造に対し予測モデルから算出された Li-H イオン交換エネルギーとその頻度。

参考文献

[1] 「イオン伝導体による革新的リチウム同位体分離技術の開発」, 星野毅, 日本原子力学会 2017 年秋の大会

*Keita Kobayashi[1], Tsuyoshi Hoshno[1]
[1]QST