

人工知能融合超高速化量子分子動力学法の開発と 蓄電池プロセスへの応用

Development of Artificial Intelligence Integrated Ultra-Accelerated Quantum Chemical Molecular Dynamics Method and Its Application to Rechargeable Battery Process

○宮野 正之¹、佐藤 愛美¹、小原 幸子¹、石澤 由紀江¹、佐藤 絵美¹、稲葉 賢二¹、
ボノー パトリック¹、三浦 隆治¹、鈴木 愛¹、宮本 直人¹、畠山 望¹、張山 昌論¹、宮本 明¹、
幸 琢寛²、小山 章²、江田 信夫²、長井 龍²、太田 璋² (1. 東北大、2. LIBTEC)

○Masayuki Miyano¹, Manami Sato¹, Yukiko Obara¹, Yukie Ishizawa¹, Emi Sato¹, Kenji Inaba¹,
Patrick Alain Bonnaud¹, Ryuji Miura¹, Ai Suzuki¹, Naoto Miyamoto¹, Nozomu Hatakeyama¹,
Masanori Hariyama¹, Akira Miyamoto¹, Takuhiro Miyuki², Akira Koyama², Nobuo Eda²,
Ryo Nagai², Akira Ota² (1.Tohoku Univ., 2.LIBTEC)

E-mail: miyano@aki.niche.tohoku.au.jp

古典分子動力学法では対応できない、化学的変化の伴う原子レベルダイナミクスについて、分子動力学法に用いるポテンシャル関数を高速な量子化学計算によって更新することで実現した、超高速化量子分子動力学法(UA-QCMD)の開発を進めている。量子化学計算については、密度汎関数法(DFT)による第一原理計算結果や実測に基づく熱力学データをよく再現するように、独自の Tight-Binding 近似に用いるパラメータを適切に構築することにより、高速かつ高精度な電子状態計算を可能としている。各原子各軌道毎に必要なこのパラメータについて、新たに人工知能を用いた自動フィッティング機能を組み込むことにより、目標値を十分に満たすパラメータを自動決定する事が可能となった。これにより、高速で信頼性の高いシミュレーションが可能となり、元素種が多い大規模系計算への応用も期待できる。本手法を、リチウムイオン電池正極材の充放電に伴う挙動解析に応用した。

現在、リチウムイオン電池正極材として、Ni, Co, Mn の三種類の遷移金属で構成される三元系が広く使用されている。三元系は高容量かつ高出力で、安定度が良いとされているが、Mn の溶出や Ni の Li 層への落ち込み等の劣化が大きな課題となっている。本研究では、この手法をリチウムイオン電池の三元系正極材内での金属挙動解析に適用した結果について報告する(Fig.1).

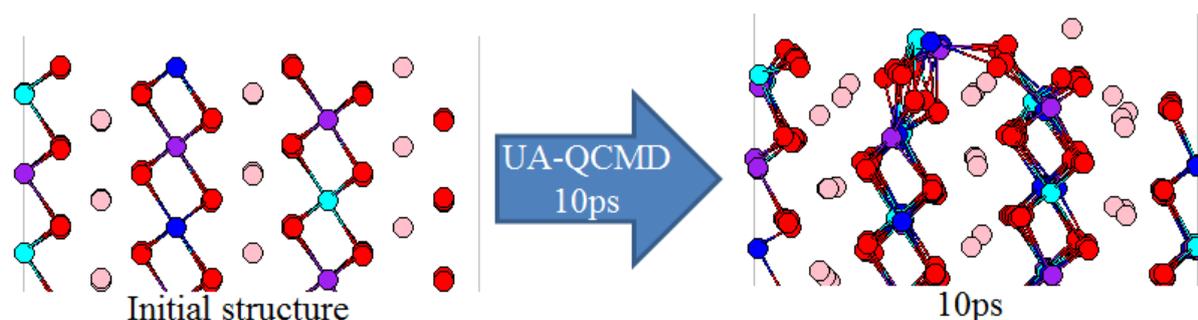


Fig. 1. UA-QCMD simulation of NCM cathode electrode ($\text{Li}_{0.48}$)