

マテリアルズ・インフォマティクスによる蓄電池用電解液材料探索

Liquid electrolyte search using materials informatics technique

物質・材料研究機構 MaDIS¹, JST さきがけ², 京都大学 ESICB³ °袖山 慶太郎^{1,2,3}

NIMS MaDIS¹, JST PRESTO², Kyoto Univ. ESICB³, °Keitaro Sodeyama^{1,2,3}

E-mail: SODEYAMA.Keitaro @nims.go.jp

近年、従来型の実験や計算により得られた大量のデータと、情報科学的なデータ科学手法を融合させることで、真に産業応用上使えるような新規材料開発を加速させるマテリアルズ・インフォマティクス(MI)による研究が発展している。例えばリチウムイオン電池(LIB)をはじめとする蓄電池では、高容量化や高出力化といった性能向上を目指した開発が実験や計算研究を通じて精力的に進められているが、必要とされる「高性能化」や「安全性向上」といった複数の機能を同時に両立させるような新規材料を、電池の種類に応じた数だけ探し出すには多大な時間が必要となってしまう。さらに正極、負極、そして有機系電解液の各構成要素それぞれに対して最適な材料探索を行う必要がある。正極および負極固体材料の探索に関しては MI を用いた報告が数多く存在する一方で、Li イオンの伝導を担う有機系電解液材料に関してはそのような研究は進んでいない。新規電極材料を使いこなせるような電解液材料の開発は喫緊の課題であり、材料探索スピードの加速が強く求められている。本講演では、計算科学による LIB 電解液の解析事例を示した後に、MI を用いた電解液材料の特性を予測する記述子の自動抽出例と、それに基づいた新規電解液探索手法確立に向けた取り組みについて紹介する。具体的には Li イオンの配位エネルギーを予測する記述子抽出を例にとり、データ科学手法の適用例を紹介する。

記述子候補のデータベースを構築するため、キシダ化学株式会社のカatalogより、バッテリーグレードの溶媒 103 種に関して単分子クラスターモデル計算(B3LYP/cc-pVDZ)を行った。さらに Li イオンに配位した構造に関して構造最適化を行った。これらに対しデータ科学手法(多変数線形回帰(MLR)、LASSO、線形回帰による全状態探索法(ES-LiR))を用いた機能予測を行った。

配位エネルギー予測を行った結果、ES-LiR 法が最も精度が高いことを確認した¹。また図 1 に ES-LiR 法により抽出された記述子を示す。溶媒酸素の Mulliken 電荷および Li 酸素間の距離が安定的に機能説明能力を持つことが分かる。このようなデータ科学手法は、電解液機能を説明する記述子抽出に有効であり、今後説明変数を増やしていくことで、より広範な機能に対する材料探索が可能になると期待できる。

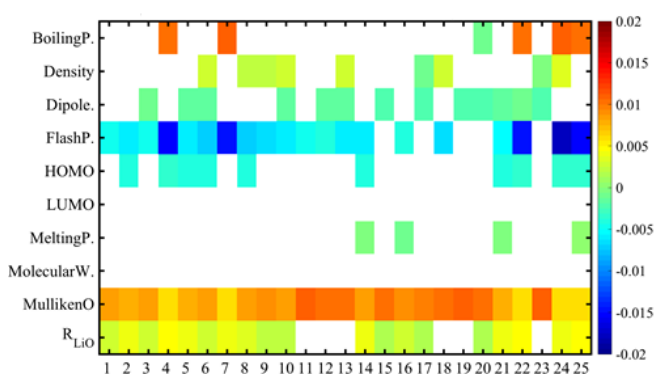


図 1. 配位エネルギー予測精度の高い記述子群のウェイトダイアグラム

[1] K. Sodeyama, Y. Igarashi, T. Nakayama, Y. Tateyama, M. Okada, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, in press (2018).