

マテリアルズインフォマティクスを活用した長寿命電池材料の探索

High Throughput Screening for Long-Life Battery

住友金属鉱山¹, 北陸先端大情報基盤², JST さきがけ³, 北陸先端大情報⁴, 理研⁵

○吉田 智大¹, 本郷 研太^{2,3}, 前園 涼^{4,5},

Sumitomo Metal Mining¹, RCACI, JAIST.², PRESTO, JST³, Sch. Info. Sci., JAIST⁴, RIKEN⁵,

○Tomohiro Yoshida¹, Kenta Hongo^{2,3}, Ryo Maezono^{4,5}

E-mail: TomohiroT_Yoshida@ni.smm.co.jp

新材料設計へのデータ科学や機械学習の活用が近年爆発的な注目を集めている。マテリアルズインフォマティクス (MI) と呼ばれるこの分野はここ数年で誕生した新しいものであるが、すでに実用的な成果が多数報告されている。中でも環境保護の観点から注目を集めているリチウムイオン電池 (LIB) 材料は MI の格好の舞台となっている[1-3]。

本研究では MI 技術を活用した長寿命電池材料の探索について報告する[4]。一般に LIB は充放電を繰り返すことにより電池容量が低下するが、高容量 LIB 正極材料として注目を集める LiNiO₂ (LNO)は容量維持率が他の正極材料と比較して低いことが課題となっている。充放電サイクルによる容量低下の原因はいくつか考えられるが、LNO においては充電による結晶構造の大幅な変化が主要因である[5]。そこで長寿命 LNO の実現を目指し、充放電に伴う結晶構造変化を抑制する添加元素のハイスループットスクリーニングを実施した。当日はファンデルワールス汎関数を用いた密度汎関数理論計算により LNO 結晶構造の変化が高い精度で計算できること、並びに結晶構造変化を抑制する添加元素について報告する。

[1] G. Ceder, MRS bull. 35 (9), 693 (2010).

[2] M. Nishijima *et al.*, Nat. Commun. 5, 4553 (2014).

[3] M. Aykol *et al.*, Nat. Commun. 7, 13779 (2016).

[4] T. Yoshida, K. Hongo, R. Maezono, arXiv:1901.02261.

[5] C. S. Yoon *et al.*, ACS Energy Lett. 2, 1150 (2017).