

MI によるリチウムイオン電池長寿命化へむけた置換元素の探索と相乗効果

Synergy of Two-Element Substitution for Long-Life Battery Revealed by MI

住友金属鉱山¹, 北陸先端大情報², 理研³, 北陸先端大情報基盤⁴, JST さきがけ⁵, 物材機構⁶

○吉田 智大¹, 前園 涼^{2,3}, 本郷 研太^{4,3,5,6}

Sumitomo Metal Mining¹, Sch. Info. Sci., JAIST², RIKEN³, RCACI, JAIST⁴, JST⁵, NIMS⁶

○Tomohiro Yoshida¹, Ryo Maezono^{2,3}, and Kenta Hongo^{4,3,5,6}

E-mail: tomohiro.yoshida.r7@smm-g.com

マテリアルズインフォマティクス (MI) が環境問題への解決策として注目を集めるリチウムイオン電池の開発へ盛んに応用されている[1,2]。我々も MI を活用したリチウムイオン電池正極材料の研究開発を進めている[3,4]。ターゲットは高容量・低コストで注目を集める LiNiO_2 である。 LiNiO_2 を正極材料としたリチウムイオン電池は充放電を繰り返したのちの電池容量の維持率が他の正極材料を使用したものと比較して低く、克服が強く求められている。電池容量低下の要因の一つは充放電に伴う結晶構造変化である[5]。そこで Ni を別元素で置換した場合の結晶構造変化を第一原理計算により算出し、置換元素のハイスループットスクリーニングを実施した。その結果電池容量維持率を向上させる元素として Nb を報告している[3]。

本研究では置換元素の探索範囲を広げ Ni を 2 つの元素で置換した[4]。2 元素置換の場合組み合わせの数は爆発的に増加するため、第一原理計算においてもすべての候補について調査することは困難である。そのためこれまでは単体で電池性能を向上させる元素同士を組み合わせた材料が開発のターゲットであった。しかし単体では効果がなくとも、別元素と組み合わせることで電池特性を大きく向上させる可能性があり、この点についてこれまで考慮されたことはない。

膨大な候補の中から結晶構造変化抑制の効果の高い候補を効率的に抽出するため、ベイズ最適化を用いた高効率スクリーニングを実施した。その結果ある元素と組み合わせることで高い結晶構造変化抑制効果を示す元素を発見し、そのメカニズムを考察した。

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

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

[3] T. Y., K. Hongo, and R. Maezono, J. Phys. Chem. C 123, 14126 (2019).

[4] T. Y., R. Maezono, and K. Hongo, arXiv: 2001.02876.

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