

マテリアルズ・インフォマティクスを活用したポリフェニレンエーテル系固体電解質の製法・構造・物性の相関解明

(早大理工) ○島山 歆・梅木 桃花・足立 裕樹・小柳津 研一 Revealing the relationships between processes, structures, and properties of poly(phenylene ether)-based solid-state electrolytes by materials informatics (*Dept. of Applied Chem., Waseda Univ.*)

○Kan Hatakeyama-Sato, Momoka Umeki, Hiroki Adachi, Kenichi Oyaizu

We developed a new, flowchart-based materials informatics system that can analyze various process and material data of experiments. New glassy aromatic electrolytes were explored using the system. Data science-assisted analyses of the materials' processes, structures, and properties helped us reveal the optimal strategy of highly conductive electrolytes with $\sigma_{Li} \cong 10^{-4}$ S/cm at room temperature and understand their mechanisms.

Keywords : Materials informatics; Polymer electrolyte; Solid-state lithium-ion battery

マテリアルズ・インフォマティクス¹はデータ主導の研究手法として注目を集めているが、実際の運用にあたっては、複雑な製法・材料データの記録や解析等に困難を伴うことが多い。本研究では、フローチャート形式で記録された操作と実験結果の関係性をグラフ構造として明示的に記録し、自動解析するシステムを設計した(**Figure 1**)。

例題として、ポリフェニレンエーテルのような芳香族系ポリマーからなるガラス状電解質²の合成過程とイオン伝導度等の解析結果を記録した。研究中に得た 500 件以上の製法・構造・物性(インピーダンス・NMR・DSC・XRD 等)のデータを機械学習の手法で解析しながら研究を推進することで、室温で 10^{-4} S/cm 程度の Li^+ 伝導性を示す固体電解質の作製法や伝導メカニズムの解明が可能になった³。

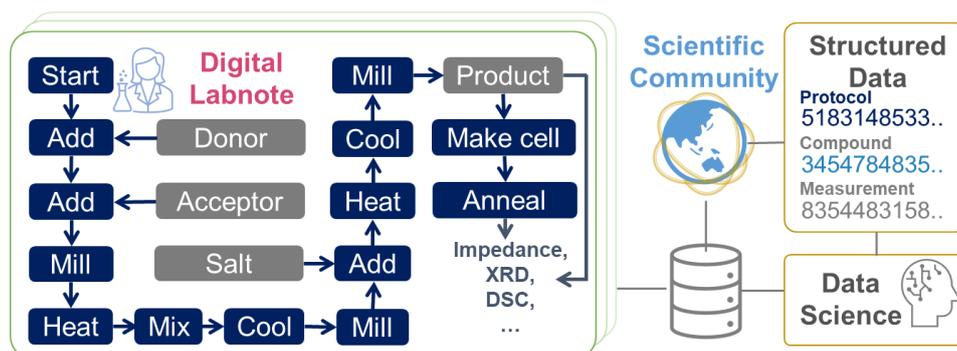


Figure 1 Data processing scheme by the system.

- 1 R. Ramprasad, R. Batra, G. Pilania, A. Mannodi-Kanakkithodi, C. Kim, *Npj Comput. Mater.* **2017**, 3, 54.
- 2 K. Hatakeyama-Sato, T. Tezuka, M. Umeki, K. Oyaizu, *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, 142, 3301.
- 3 Manuscript in preparation.