

Li イオン電池電解質開発のハイスループット化とインフォマテックス

High-throughput Experiments and Informatics for

Accelerating Discovery of New Electrolytes for Lithium-ion Batteries

物質・材料研究機構 ○松田翔一

National Institute for Materials Science, °Shoichi Matsuda

E-mail: MATSUDA.Shoichi@nims.go.jp

次世代蓄電池の研究開発の現場において、近年、マテリアルズ・インフォマティクス (MI) と呼ばれるデータサイエンスを用いた材料探索の高速化・効率化に関する試みが盛んである。従来の研究者の経験と勘に頼った材料探索に替わって、材料データベースや機械学習などを活用することで、新材料発見の時間やコストの削減が可能となる。蓄電池は、正極/負極/電解質の主要3材料で構成され、その組み合わせが性能向上の鍵となる。その中でも、電解液は、有機溶媒、リチウム塩といった主構成要素に加え、微量濃度成分が複数種添加されており、様々な化合物の中から最適な組み合わせを見つけ出す必要があり、探索する候補の数は膨大である。電解液の評価においては、電極との反応性を考慮する必要があるため、計算化学的なアプローチは容易ではない。また、解析のもととなる実験データも不足しており、MIを用いた材料探索が進んでいない状況にある。そこで我々の研究グループでは、人手よりはるかに高速に実験を行うことができる実験自動化ロボット (ハイスループット電池評価システム) を開発した。これを使えば、50種類以上の化合物を組み合わせる様々な組成の電解液の作製から、その電池特性を評価する作業に至るまで、全てを自動で行うことができる。人が行っていたときには1日10サンプル程度の評価しかできなかったものを、実験自動化ロボットを用いることで1日1000サンプル以上の評価が可能になる。さらに、取得した大量の実験データに対して、ベイズ最適化に代表されるMI手法を適用することで、より効率的に高機能電解液を探索することが可能となる。



ハイスループット電池評価システム装置：(左)分注操作ユニット：組成の異なる電解液をそれぞれのセルに注入、(中)システムの全体像、(右)電極部：プレートの上下で電極を挟み、電解液特性を計測

参考文献：S. Matsuda, K. Nishioka, S. Nakanishi, *Scientific Reports*. 2019, 9, 6211.