

マテリアルズ・インフォマティクスを用いた エネルギー材料設計

Keywords: 蓄電池用電解液材料 第一原理分子動力学法 機械学習手法

エネルギー材料設計グループ

袖山 慶太郎

SOHEYAMA. Keitaro@nims.go.jp | <http://www.nims.go.jp/research/group/energy-materials-design/index.html>



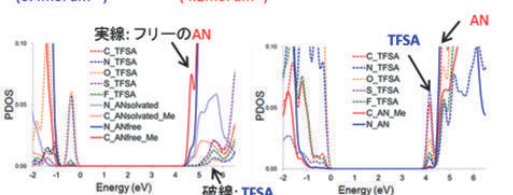
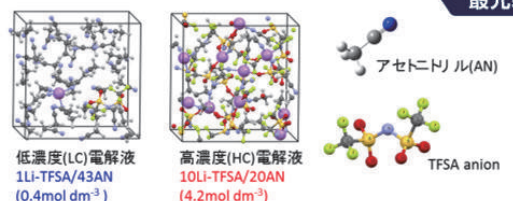
研究の背景

- 第一原理計算および実験から得られるデータと機械学習手法を融合させた新規材料の設計
- リチウムイオン電池用電解液を初めとする液体材料の特性発現メカニズムの理論的説明
- バーチャルスクリーニングによる効率的な新材料提案手法の確立

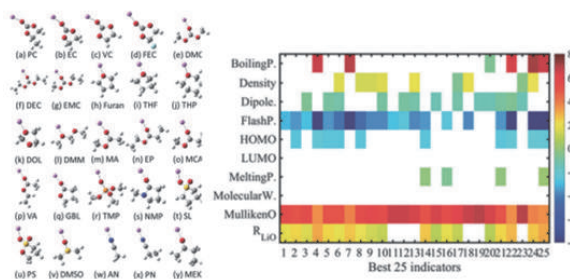
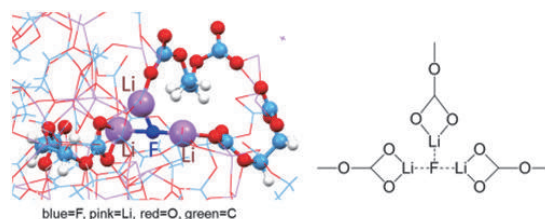
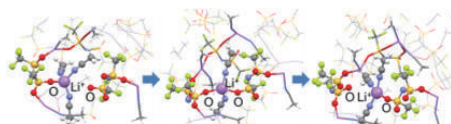
研究の狙い

- エネルギー材料、特に蓄電池用電解液材料を機械学習手法を用いて提案する。
- 実験系における本質的な謎を、第一原理計算および機械学習手法を用いて実験研究者と共に解明し、得られたメカニズムをオリジナルな記述子とした材料設計を行う。

最先端研究トピックス



高濃度電解液における還元耐性向上メカニズムの解明: 第一原理分子動力学法に用いたセル (上) および電子状態変化 (下)



文献

- ・ K. Sodeyama, Y. Igarashi, T. Nakayama, Y. Tateyama, M. Okada, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, in press (2018). DOI: 10.1039/c7cp08280k
- ・ J. Wang, Y. Yamada, K. Sodeyama, E. Watanabe, K. Takada, Y. Tateyama, A. Yamada., *Nature Energy*, 3, 22–29 (2018).

まとめ

- 第一原理計算による高濃度電解液の還元耐性向上およびLiイオンの拡散メカニズムを解明
- SEI被膜を安定化するLiFクラスター構造を提案
- 機械学習手法であるES-LiR法を電解液材料に適用

実用化への目標

- 新規解明したメカニズムによる記述子の提案
- バーチャルスクリーニングを行うための新規分子材料の自動生成と機能による絞り込み
- MI用実験データの収集と提案材料の合成