

「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的  
マテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築」  
2017年度採択研究者

2018年度 実績報告書
-----------------

鈴木 耕太

東京工業大学物質理工学院  
助教

合成-情報科学の融合によるリチウムイオン導電体の探索手法開拓

## § 1. 研究成果の概要

究極の安全性と低コストを兼ね備えた全固体リチウム電池の実現には、大気中で安定な酸化物系のリチウム導電体が必要不可欠である。新規な酸化物系リチウムイオン導電体の発見を目指し、機械学習によって予測される未知な安定組成情報を活用した物質探索法の開発を行った。(i) 古典的な擬似三成分系相図中における探索に機械学習から得られる情報を組み合わせる手法、(ii) 機械学習の予測レートを指針とした手法、の二つの方針を検討した。

手法(i)ではリチウム導電体の報告がある  $\text{Li}_2\text{O}-\text{GeO}_2-\text{ZnO}$  系の相図に着目した。既知組成の連結線および未知安定組成を様々な条件で合成し、組成最適化により既存の類縁組成材料と比べて一桁イオン導電率の高い物質の発見に至った。相図中の組成を網羅的に合成した結果をまとめた相生成マップを作成した。この相図においては予測情報の活用により、網羅的探索に比べて三倍程度探索の効率が向上したことが分かった。

手法(ii)では、相図にとらわれず未知安定組成において、遷移金属を含まない、リチウム導電体に含有される元素を有す、という制約条件を加えて予測レートが高い順に合成した。 $\text{Li}-\text{Nb}-\text{P}-\text{O}$  系の材料(予測レート 0.6)で未知の構造が見いだされ、合成条件の最適化により新規リチウム導電体を得ることができた。予測レートを指針とすることで、様々な構成元素からなる新物質発見が加速できることが分かった。

## § 2. 研究実施体制

- ① 研究者:鈴木 耕太 (東京工業大学物質理工学院 助教)
- ② 研究項目
  - ・物質合成、構造解析、電気化学特性解析