

高精度DFT-MD法とデータ科学を融合させた新規高濃度電解液探索

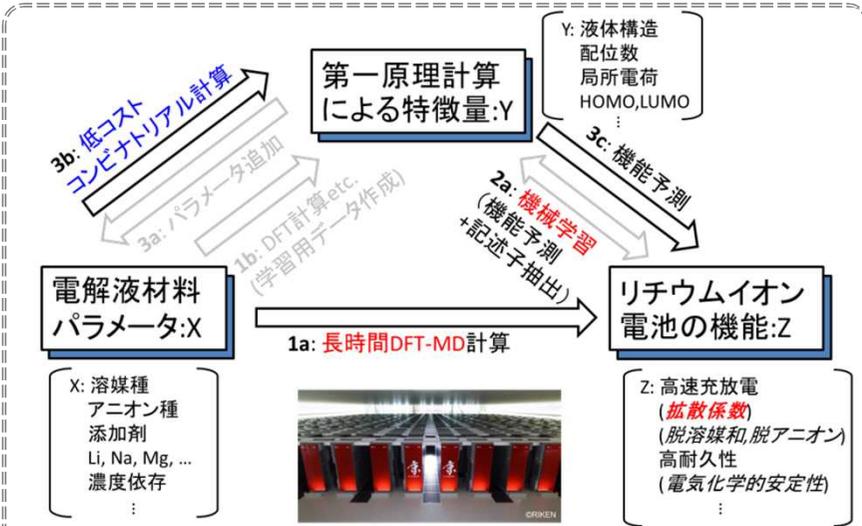


袖山慶太郎 (物質・材料研究機構・統合型材料開発・情報基盤部門・グループリーダー) (H29-H32年度)

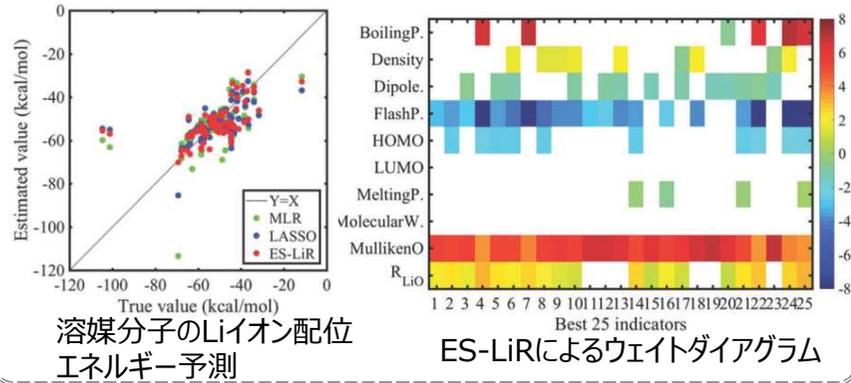
研究の概要

高機能リチウムイオン電池実現に向けて、新しい電池材料探索のスピード加速が求められている。電池の構成要素の中で正極および負極固体材料の探索にはマテリアルズ・インフォマティクスを用いた報告が多くある一方、Liイオン伝導を担う電解液材料に関してはそのような研究は進んでいない。本研究では、まず多数の電解液に関するデータベースを第一原理計算により構築する。次に、高性能化したい物理量の記述に本質的に必要となる特徴量をデータ科学手法を用いて抽出し、それに基づいた新規電解液探索手法を確立する。これら技術は他の新規材料探索分野への普及が期待できる。

研究領域「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」
(研究総括: 常行真司、H27年度発足)



電解液材料のマテリアルズ・インフォマティクス



研究の成果

カタログに記載されている電池用溶媒103種に関して単分子クラスターモデル計算を行い、融点、沸点といった実験値と共に、HOMO、LUMO、溶媒分子中酸素のMulliken電荷、Liと溶媒酸素間の距離などの値をデータベース化した。これらに対し、データ科学手法(多変数線形回帰(MLR)、LASSO、線形回帰による全状態探索(ES-LiR)法を用いた帰納予測を行った。Liイオンの配位エネルギー予測を行った結果、ES-LiR法が最も高精度に予測できることを確認した。さらにウェイトダイアグラムを描くことで、どの記述子を使うと、どの程度の予測精度が得られるかが分かるため、記述子を求めるためのコストをコントロールした、記述子設計が可能となることが明らかとなった。

参考文献・リンク

1. “Liquid electrolyte informatics by exhaustive search with linear regression”, Keitaro Sodeyama, Yasuhiko Igarashi, Tomofumi Nakayama, Yoshitaka Tateyama, Masato Okada, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **20**, 22585–22591 (2018).

(注1) 募集要項第7章「戦略目標」をご参照ください。