

## 全固体リチウムイオン電池向け新規電解質探索

中山将伸：名工大院工／NIMS-cMi<sup>2</sup>、Jalem Randy：NIMS／JST-さきがけ

現行のリチウムイオン電池は、電解液に可燃性の有機物質を用いていることから、電気自動車用の車載電池のような大型化のために安全性向上が求められている。その観点で、近年、安全な電池として、電解質材料に不燃性の酸化物セラミックス・リチウムイオン伝導体（固体電解質）を用いた全固体型リチウムイオン二次電池が注目されている。これまでに、 $\beta$ アルミナ LISICON, NASICON, ペロブスカイト, ガーネットなどの材料が検討されてきたが、イオン伝導性や電気化学的安定性が不足していることが実用化の障壁となっており、このような課題を解決するためには、既存の材料のマイナーチェンジではない、まったく新しい組成・構造を有した新規材料の探索が必要である。

従来の新規材料探索は主に研究者の知識・経験と直感に基づく実験的試行錯誤であり、膨大な時間と労力が必要な作業である。しかし、近年では第4の科学といわれるデータサイエンスに基づいた材料探索が注目されている。また、第一原理計算や古典力場などに代表される材料シミュレーションの技術についても、計算機ハードウェアやソフトウェアの急速な発展・充実により、実験結果をコンピュータ上で再現することができるようになってきた。

そこで本研究では、材料シミュレーションとデータサイエンスを組み合わせ、新規の全固体電池用固体電解質探索をした結果について発表する。具体的には、電極材料のうちで化学的安定性とレート特性に優れた材料である Olivine 型や Tavorite 型材料 (Fig.1) に注目し、第一原理計算(DFT)と人工ニューラルネット解析(NN)によって効率的に物性推測をおこなった研究成果[1,2]について議論する。当該研究では広範囲の組成に加え複数の結晶構造を含む材料群のイオン伝導性を予測可能であることを示した (Fig.2)。また、得られた技術を延長して、次世代型 Na イオン電池の材料探索や様々な構造を含む千件程度の結晶構造に対する物性予測にも有効であることを確認した。

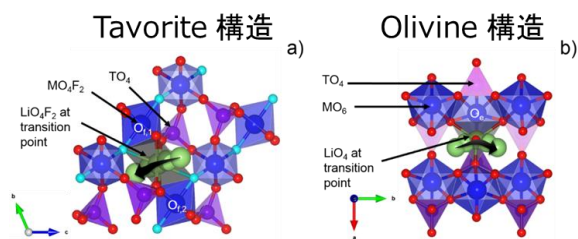


Fig. 1 a) Tavorite 構造と b)Olivine 構造

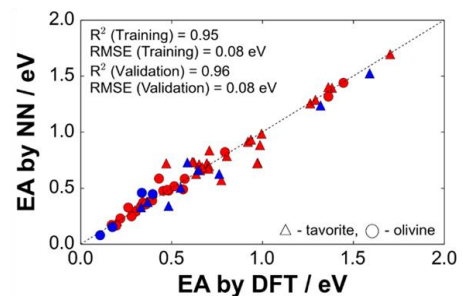


Fig.2 NN 法による DFT 物性値の推測結果

### 参考文献

- [1] Jalem, R.; Nakayama M. *et al.*, *J. Chem. Inform. Model.* **55**, 1158 (2015)
- [2] Jalem, R.; Nakayama M. *et al.*, *J. Mater. Chem. A* **2**, 720 (2014)

### 関連 web

<http://nakayama.web.nitech.ac.jp/jp/>

<https://rjalem.jimdo.com/>