

マテリアルズインフォマティクスを活用し  
リチウム電池負極用の有機材料で世界最高水準の性能を達成

JST 戦略的創造研究推進事業において、慶應義塾大学 理工学部の緒明 佑哉 准教授らの研究グループは、東京大学 大学院新領域創成科学研究科の五十嵐 康彦 助教らと共同で、マテリアルズインフォマティクス (MI) により、リチウムイオン二次電池の負極となる有機材料の新たな設計指針を確立し、極めて少ない実験数で高容量・高耐久性の材料を得ることに成功しました。

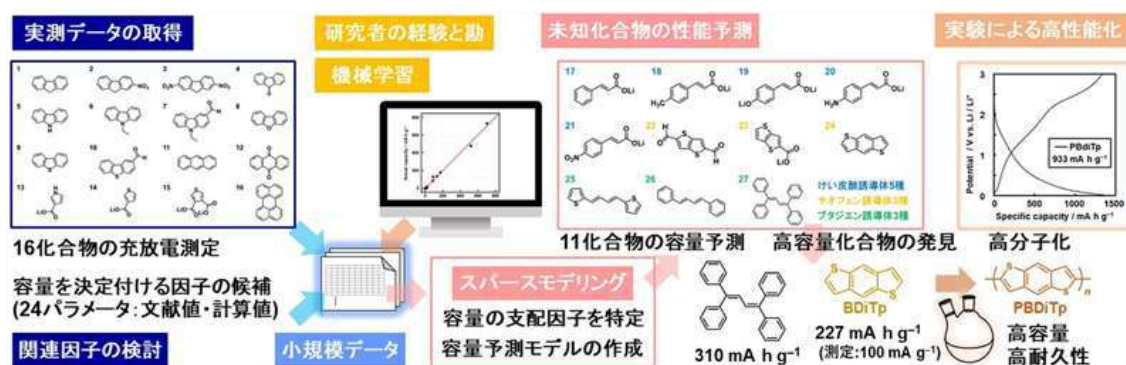


図 実験主導型 MI による有機負極材料の効率的な探索

電池の省資源化に向けて、金属を使わない有機材料が世界的に研究されています。リチウム電池やナトリウム電池などの負極材料の探索は従来、研究者の試行錯誤や経験と勘に頼らざるをえませんでした。

MI は一般に、大規模なデータ (ビッグデータ) に対して機械学習を行い、研究者の経験と勘の関与を減らすための手段です。実験科学者が小規模な自前のデータや経験知をどう活用するかは課題でした。

研究グループは、小規模でも比較的正確な実験データと実験科学者の経験と勘を融合した「実験主導型 MI」の手法を研究し、これまでもナノシート材料の収率向上などを達成してきました。

本研究では、まず 16 個の有機化合物について負極としての容量を実測し、容量を決定付けている少数の要因を、データ科学的手法の 1 つであるスパースモデリングで抽出しました。この学習結果に基づく容量予測モデルを使い、研究者の経験と勘も交えながら、市販の化合物の中から負極としての性能が未知の 11 個の化合物を選び出し、実験をする前に容量の予測値を算出しました。

その中から予測容量が高かった3個の化合物について、100mAhg<sup>-1</sup> (ミリアンペア毎グラム) と比較的高い電流密度の充放電で容量を実測すると、2個の化合物 (benzo[1,2-b:4,5-b']dithiophene(BdiTp)、trans,trans-1,4-diphenyl-1,3-butadiene) で 227mAhg<sup>-1</sup> (ミリアンペアアワー毎グラム) および 310mAhg<sup>-1</sup> と、実際に高い容量を示しました。

さらに予測モデルを使うと、そのうちの1つであるチオフェン化合物 BdiTp は、推定される重合体の合成によりさらに容量が向上することが予測されました。実際に、BdiTp は電解重合によって容易に高分子にすることができ、ナノフレーク状に均一に分散させて電極を作製すると、電流密度 20mAhg<sup>-1</sup> の充放電で 933mAhg<sup>-1</sup> の高容量と、充放電を繰り返しても容量劣化が少ない高耐久性を両立した高分子負極材料を得ることができました。この BdiTp の重合体は、有機材料による負極の中で世界でも最高水準の高容量と高耐久性を両立することができました。

本研究で確立した有機負極材料の設計指針は、さらなる性能向上を目指す上で重要となります。また、少ない実験データ、研究者の経験と勘、機械学習を融合し、高性能な材料の探索に成功したことで、実験科学と MI との融合が材料探索を効率化する手法の有効性が示されました。

本研究成果は、2019年9月6日に国際科学誌「Advanced Theory and Simulations」のオンライン速報版で公開されます。

日文新聞发布全文 <https://www.jst.go.jp/pr/announce/20190906/index.html>

文：JST 客观日本编辑部翻译整理