

# AI 手法を導入した全固体リチウム二次電池の効率的な材料探索法を実証

## ー 材料研究・開発の期間短縮による産業競争力強化にも期待 ー

名古屋工業大学大学院工学研究科及びフロンティア研究院の研究グループは、全固体リチウム二次電池として有力視される固体電解質材料の研究開発において、従来の材料研究の手法に AI やデータサイエンスのアイデアを加味することで研究開発を効率化する手法を直接的に材料実験に適用して、材料探索を効率的に決定できることを実証しました。さらに、イオン伝導性と機械特性(焼結密度)などの複数の材料物性を考慮した探索も効率化が可能であることも確認しています。

### 研究の背景

次世代の電気自動車車載電池として、安全性・性能の両立の観点から全固体リチウム二次電池の開発・実装が期待されています。この商用化には、固体電解質と呼ばれる材料のリチウムイオン導電性能向上が求められています。

固体電解質は、シリコン半導体と同様に、異元素（ドーパント）のわずかな添加によりイオン導電性が数桁向上するなどの効果が知られています。従前から、このドーパントの最適な選択や添加量は、研究者の経験と直感による試行錯誤で、膨大な数の繰り返し実験によって絞り込むことを必要とし、開発期間が長期化する結果となっています。

### 研究の内容

本研究では、高いリチウムイオン導電性を示し容量の大きい金属リチウム負極に対して安定している固体電解質材料(NASICON 型リン酸ジルコニウムリチウム,  $\text{LiZr}_2(\text{PO}_4)_3$ )に、ドーパントである Ca(カルシウム)イオンと Y(イットリウム)イオンを同時に添加することで、イオン導電性と焼結密度の向上を目指しました。二種のドーパントを添加した材料 47 組成を実際に合成して特性を評価したところ、図 1 に示すように結晶構造、焼結密度、不純物生成量、リチウムイオン導電特性には複雑な相関関係があることが分かりました。

このような材料特性を踏まえて、直感や経験に基づいて最適な異元素や添加量

を見出すことは、非常に困難であると考えられます。

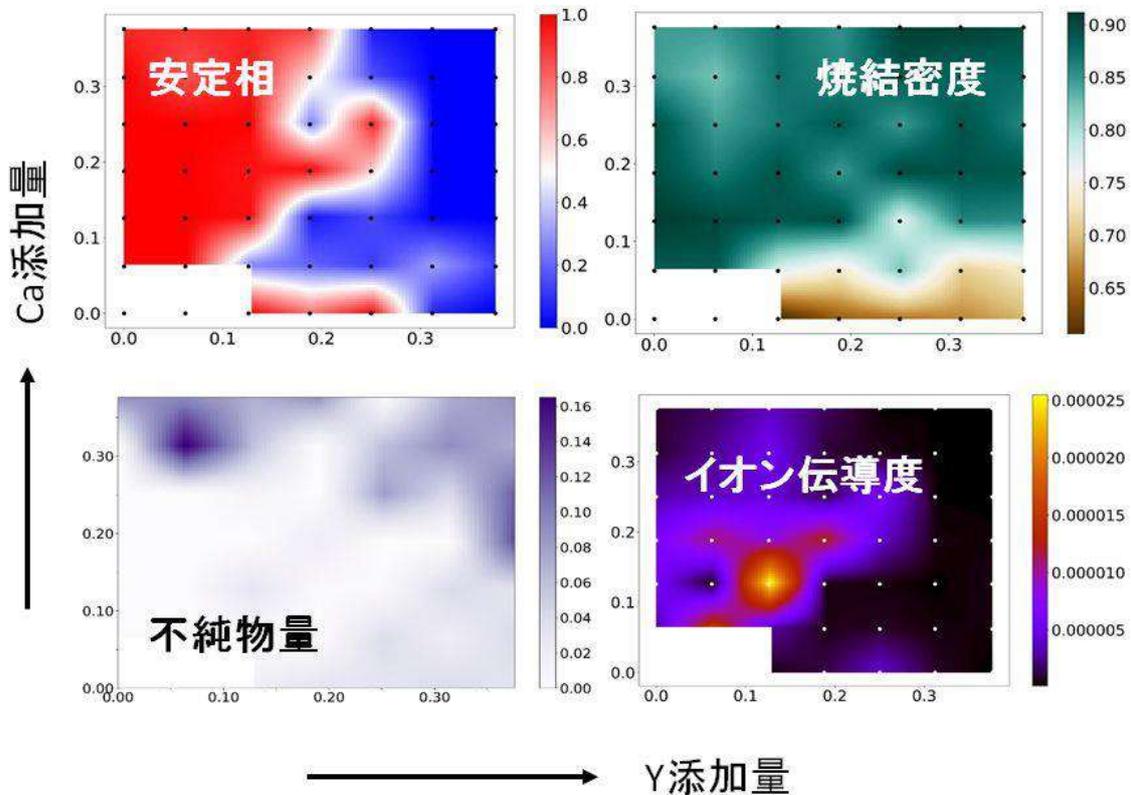


図 1 カルシウム (Ca:縦軸)とイットリウム (Y: 横軸)の添加量を様々に変化させたときに、実験的に観測される、安定相の結晶構造分布(六方晶構造/単斜晶構造の生成比率を赤/青で表示)、不純物量(不純物量が多いほど濃紫で表示)、焼結密度(機械強度の優れた材料ほど緑色で表示)、リチウムイオン導電性(高いイオン導電性を示すほど黄色)を色彩の変化で図示しています。2種のドーパントの添加量に対する各種材料特性の変化の傾向は一見するだけでは相関がなく、単純な法則から材料特性を総合的に予測することの困難性が示唆されます。

今回、AI手法の一つであるベイズ最適化による選択に従ってサンプリングした結果と実験で得られた47組成のデータを比較分析したところ、1/3の実験サンプリング数で99.9%以上の確率で最適解を見出せることを確認しました(図2)。さらに、イオン導電性と焼結密度(材料の機械的特性などに関連)の性能を同時に考慮しながら材料探索をする多目的最適化も可能であることも確認できました。

従来、研究者の経験と洞察力あるいは勘に基づいて判断されてきた「次に実験すべき組成」の選択を、AI 手法の導入により少ないサンプル数で代行できることを実証しました。

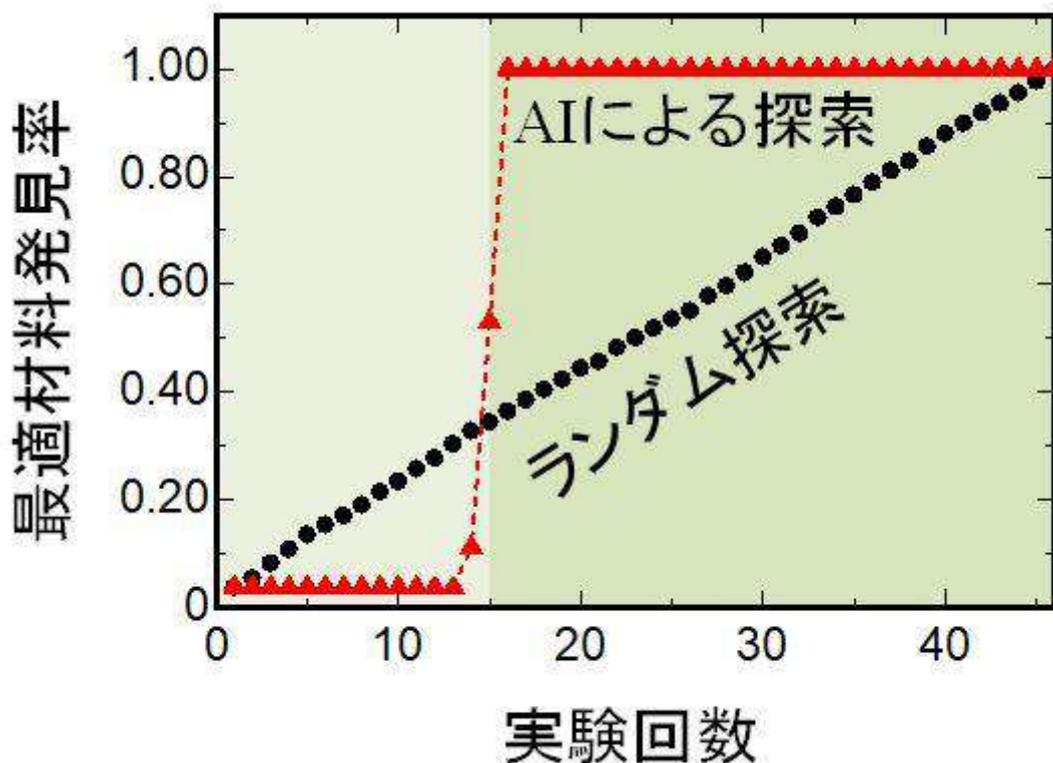


図 2 カルシウム (Ca) とイットリウム (Y) の添加量を様々に変化させた 47 サンプルの中から最も高いイオン導電率を示す材料を探索する過程を示しています。(実験回数(横軸)に対する発見確率(縦軸))。47 回の網羅的実験結果(黒点線はランダムに材料を選んだ場合の探索結果)に対して、AI 手法による材料探索では約 15 回(全サンプルの 1/3)を調査すれば、ほぼ 100%の確率で最適材料を発見できます。(赤三角点線)。

#### 論文情報

タイトル: Bayesian-optimization-guided Experimental Search of NASICON-type Solid Electrolytes for All-solid-state Li-ion Batteries

雑誌: Journal of Materials Chemistry A

DOI: 10.1039/d0ta04441e

日本語原文

<https://www.nitech.ac.jp/news/press/2020/8402.html>

文 JST 客観日本編集部