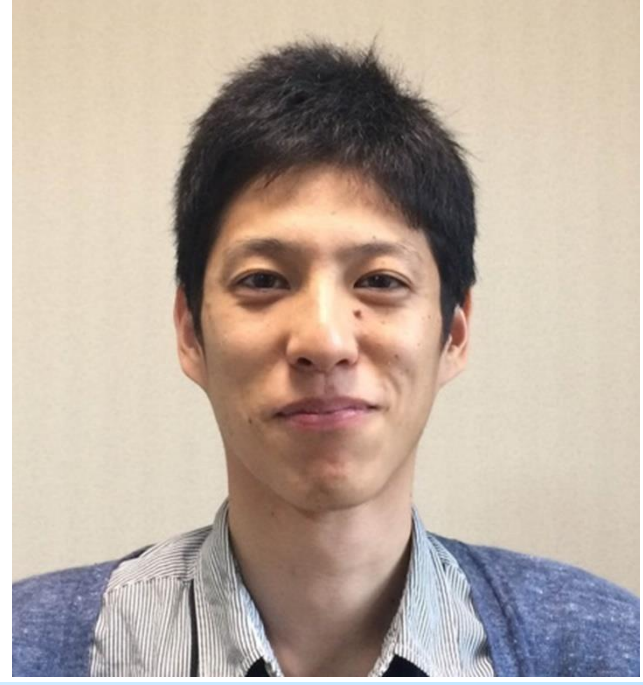


# 次世代蓄電池用電解液開発のスマートラボ化

## Robot/MI accelerates discovery of new electrolyte composition for next generation batteries



エネルギー・環境材料研究拠点 二次電池材料グループ

松田 翔一 MATSUDA.Shoichi@nims.go.jp

### 研究の背景

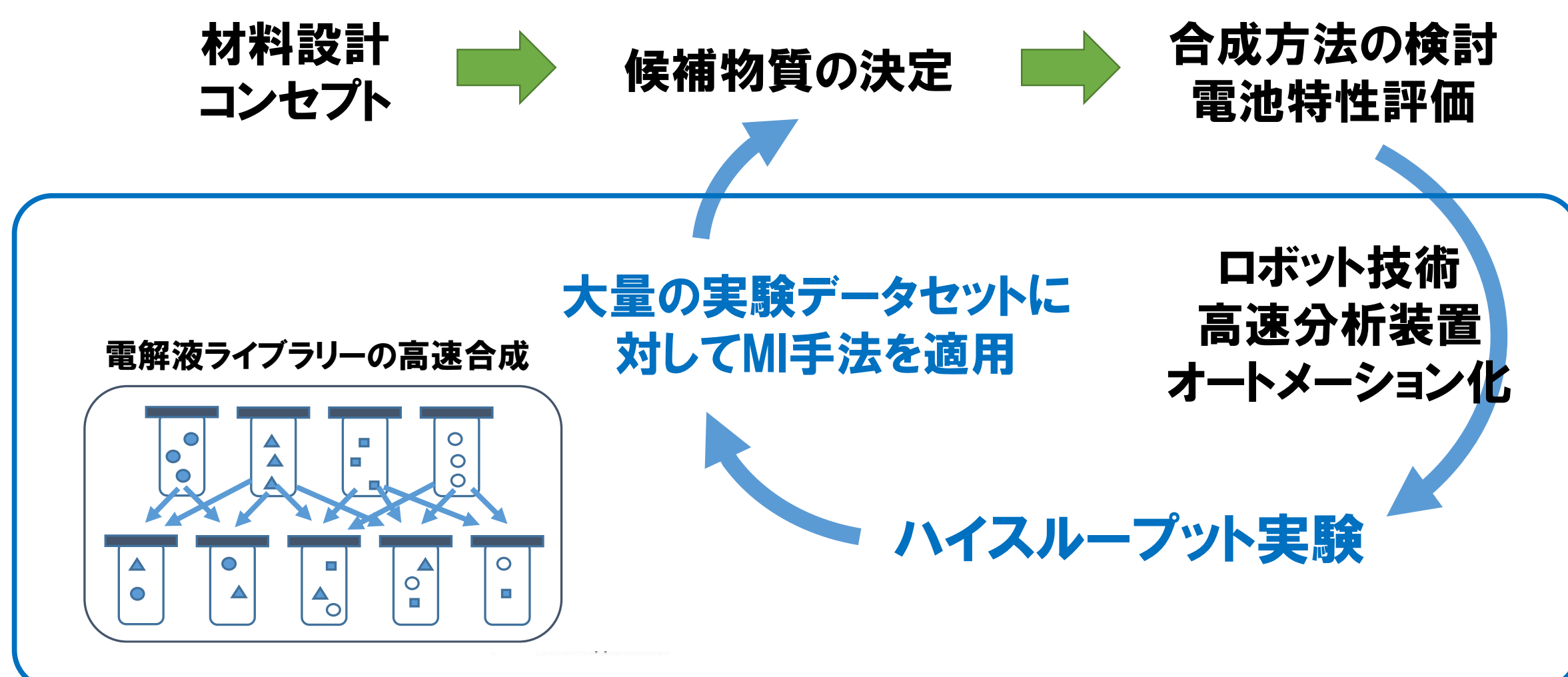
- 蓄電デバイスの高エネルギー密度化に対する高い社会的需要
- 多成分系におけるデータ駆動型の材料探索に対する期待
- 試行錯誤的アプローチによる網羅的検証の限界

### 研究の狙い

- ハイスループット電解液探索システムの構築
- オートメーション操作による均一性の高いデータセットの大量取得
- データ科学的手法(ベイズ最適化、探索アルゴリズム)の活用による高機能電解液組成の高速発見

### 最先端研究トピックス

#### マテリアルズインフォマティクスによる材料開発の加速



#### マテリアルズインフォマティクスによる電池材料開発状況

カテゴリ	用途	計算化学・データベース主導のバーチャルスクリーニング	実験主導のハイスループットスクリーニング
固体 (結晶性)	電極活物質 固体電解質	MIを用いた取り組みが近年多数報告	PLD, スパッタによる薄膜サンプル作成に関する取り組み
液体	有機電解液	計算コスト大 界面の取り扱いが困難 データベース不十分	ほとんど取り組まれていない

本研究のターゲット

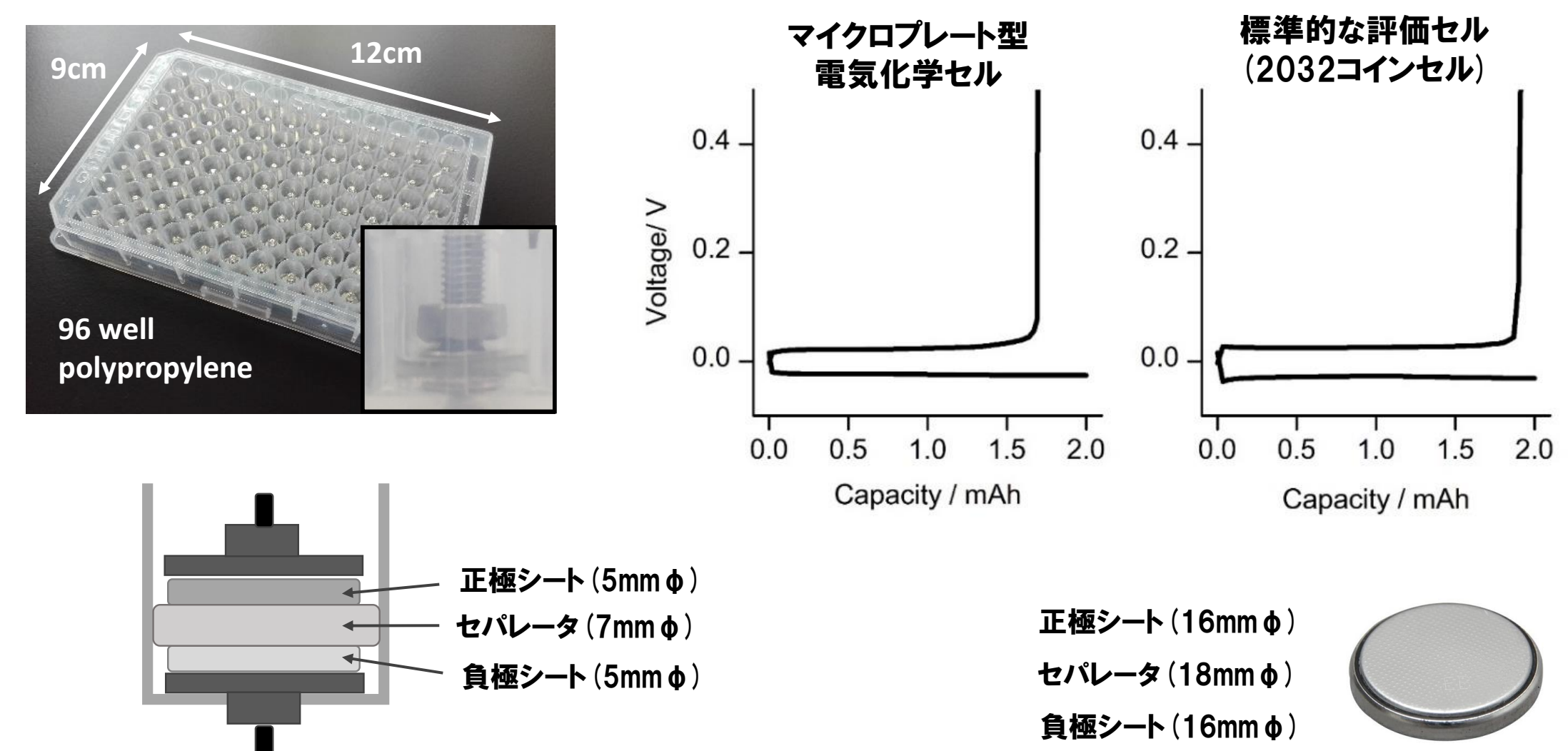
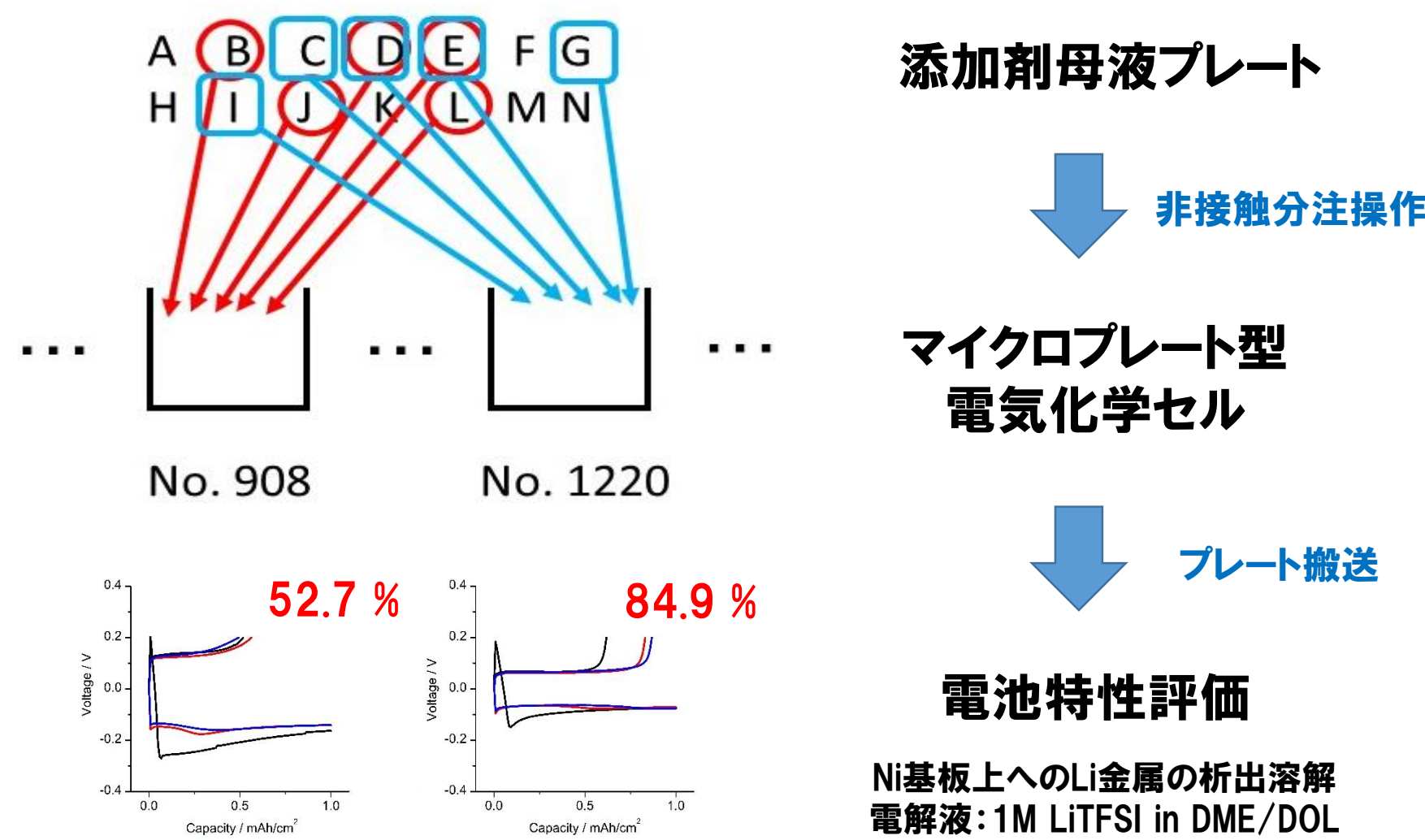
#### NIMS開発:ハイスループット電解液探索システム



S. Matsuda et al., Scientific Reports., 2019, 9, 6211

#### 添加剤母液リスト

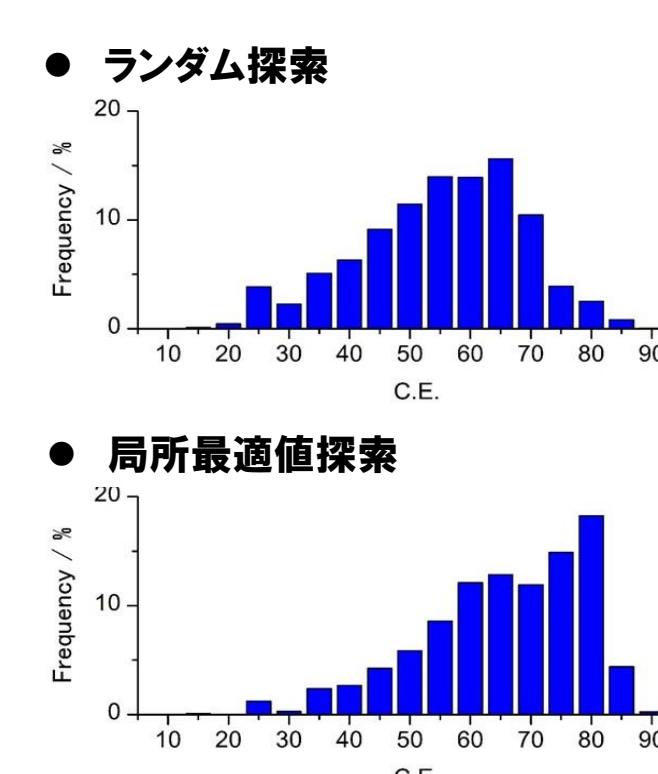
Additive	Concentration
A	LiPF <sub>6</sub> 2 wt%
B	LiBF <sub>4</sub> 2 wt%
C	LiAsF <sub>6</sub> 2 wt%
D	LiClO <sub>4</sub> 2 wt%
E	LiBOB 1 wt%
F	Li <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> 1 wt%
G	LiBr 2 wt%
H	LiCl 1 wt%
I	PC 10 v%
J	DEC 10 v%
K	DMC 10 v%
L	VC 10 v%
M	VC 10 v%
N	FEC 10 v%



化合物の協調的効果を検証するためには検討すべき組合せの数は莫大

${}^{14}C_5 = 2002$  通り  
 ${}^{32}C_5 = 201376$  通り  
 ${}^{96}C_{10} = 1279926456656$  通り

#### ■ 局所最適値探索



#### ■ ベイズ最適化

これまでの測定データから、クーロン効率が大きくなると予測される添加剤の組合せをベイズ最適化により提示し、優先的に実験

データ科学的手法を用いることで高い電池特性を示す電解液組成を多数発見することに成功

### 応用分野と今後の展開

- 探索スループット 1000 sample/dayの達成
- 1週間以上のオートメーション運転の実現
- 金属リチウム電極用の新規電解液発見

### 実用化へ向けた課題

- 様々な蓄電池材料系への展開
- 蓄電池以外の電気化学系への本システムの適用
- データ科学的手法による高機能材料組成の予測