

Introduction to the Battery Materials Group (BMG) in Mi²i

グループリーダー

正: 中山 将伸 (本務先: 名工大)
副: 館山 佳尚

✉ masanobu@nitech.ac.jp

✉ TATEYAMA.Yoshitaka@nims.go.jp



研究の狙い

Purpose

環境・エネルギー問題の切り札となる蓄電池開発を加速
飛躍的な安全性向上と高容量化を実現するポスト・リチウムイオン電池材料の高速探索
高精度材料シミュレーションに情報学(インフォマティクス)を組み合わせ、電池材料ビッグデータを構築
材料発見型シミュレーションの学理追及

研究の要点

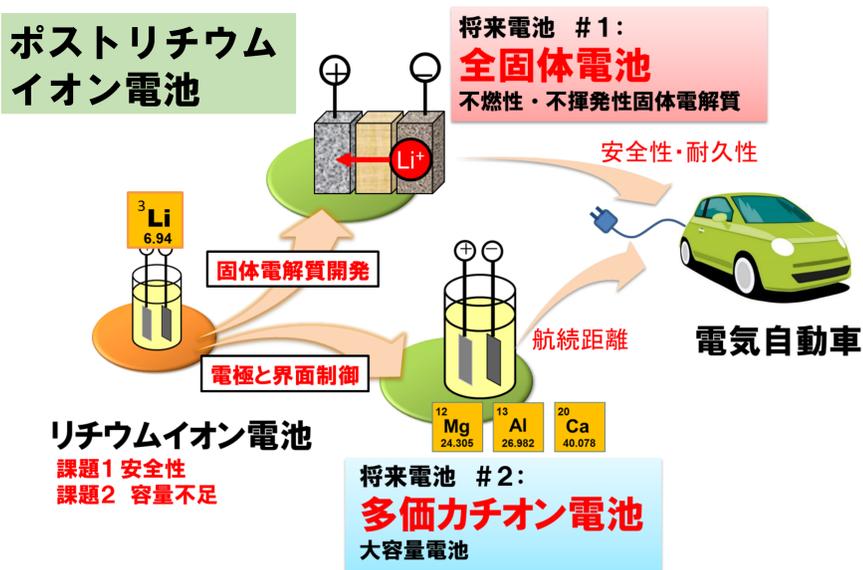
Points

電気自動車の蓄電池では(1) 安全性向上と(2)航続距離増加のため高容量化が求められている。そこで、可燃性の有機電解液を不燃のセラミックス固体電解質に置き換えることで安全性の向上を実現し、1価のリチウムイオンを多価イオン(マグネシウムなど)に置き換えることで大幅な容量アップを実現する蓄電池材料の発見に繋がる研究を行う。

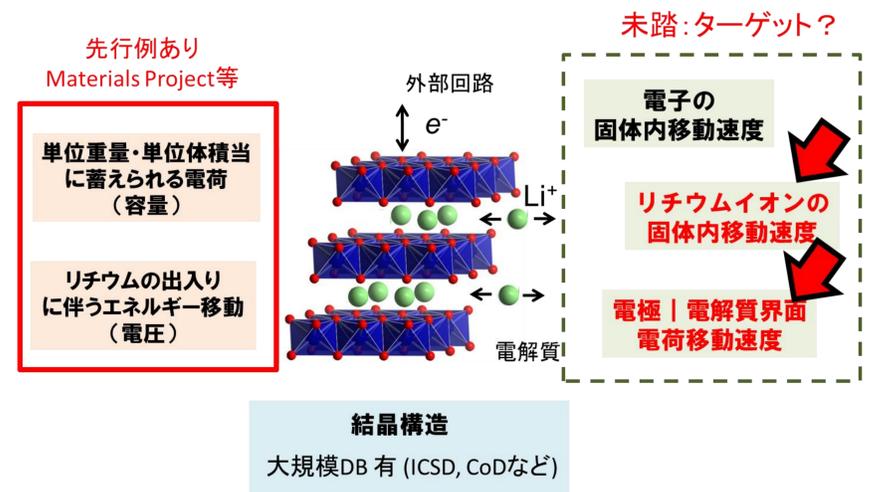
研究開発目標: 全固体電池と多価カチオン電池
Our Research Target:

計算科学: 解析から材料探索へ
Computational Science, from Analysis to Discovery

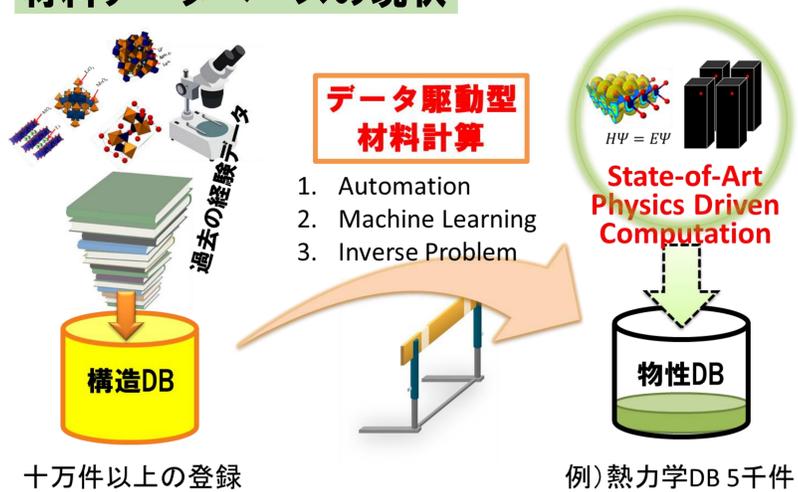
ポストリチウムイオン電池



蓄電池材料の評価項目→多くは計算可能だが、



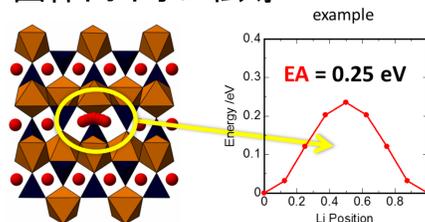
材料データベースの現状



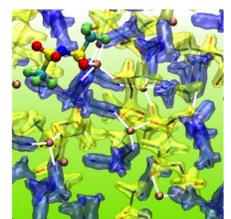
電池開発のための材料物性DB充実が必要

大量評価は未達←計算コストの課題

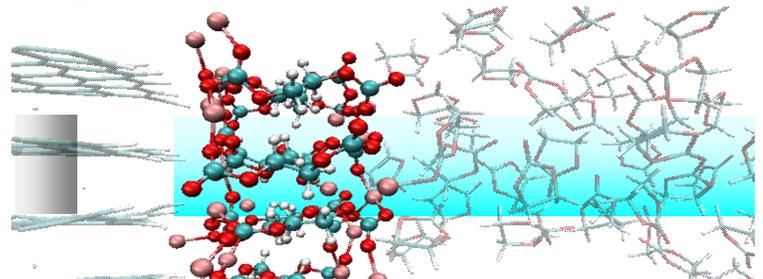
固体内イオン伝導



電解液ダイナミクス



電極 | 電解質界面電荷移動



将来展開

Application and Future Development

- 全固体電池に最適な固体電解質材料探索
- 多価カチオン電池のための電解液材料設計指針
- 個々の材料に対する計算技術を土台に高速大量評価

展開への課題

Issues of Future Development

- 既存データベースの活用: 構造デスクリプター
- 計算コストの低減による高速化と計算の精度・質の両立
- 情報学を活用した物性推測技術と設計ファクターの抽出

Introduction to the Battery Materials Group (BMG) in Mi²i

グループリーダー

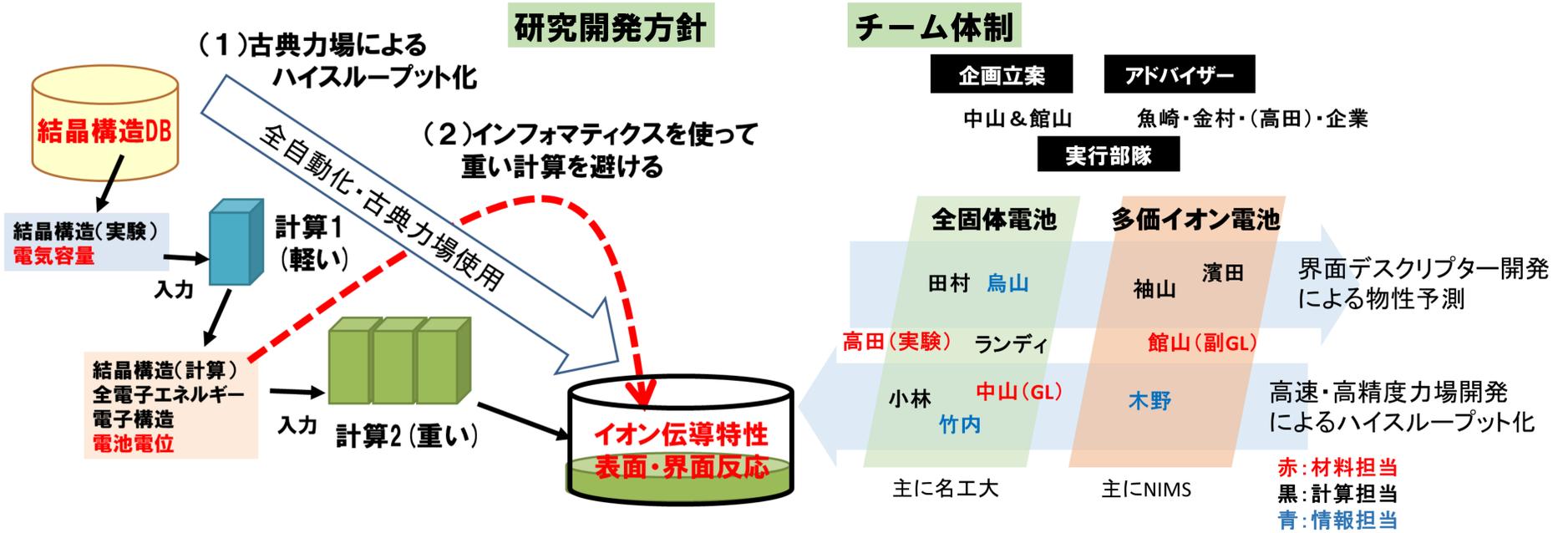
正: 中山 将伸 (本務先: 名工大)
副: 館山 佳尚

✉ masanobu@nitech.ac.jp

✉ TATEYAMA.Yoshitaka@nims.go.jp



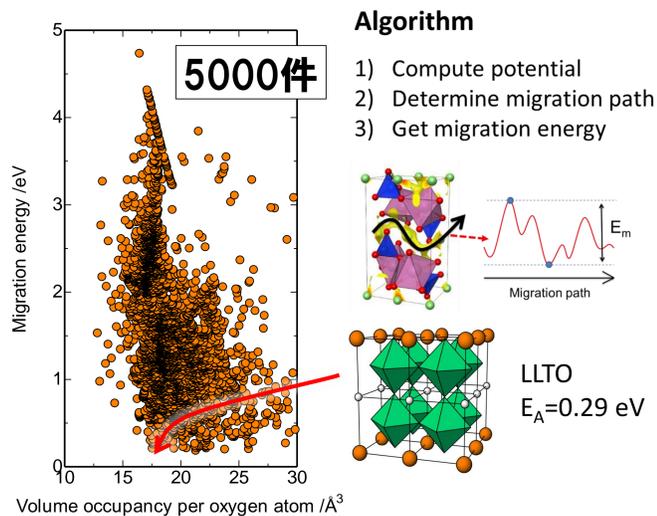
研究開発方針と体制 Direction and Members:



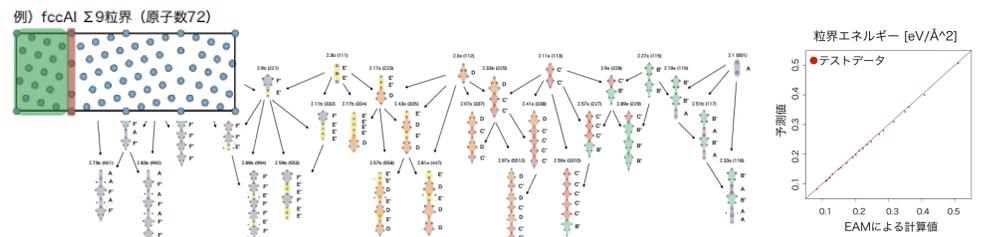
研究進捗

Examples of Research Progress

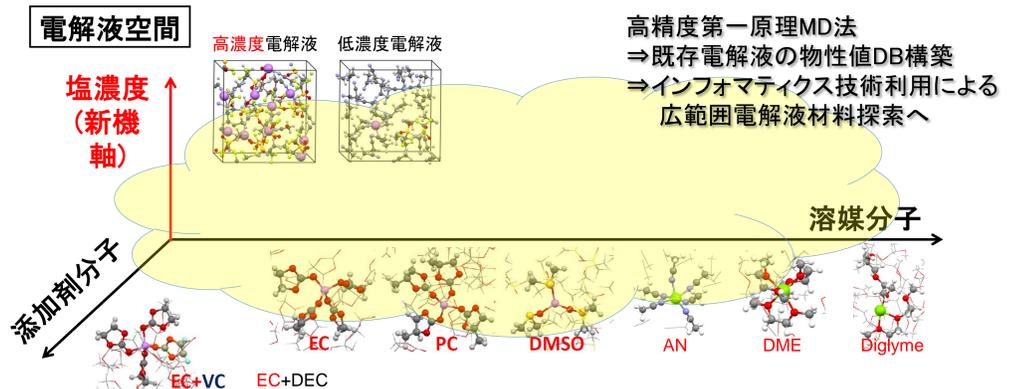
例: 力場を用いた高速Liイオン伝導性評価



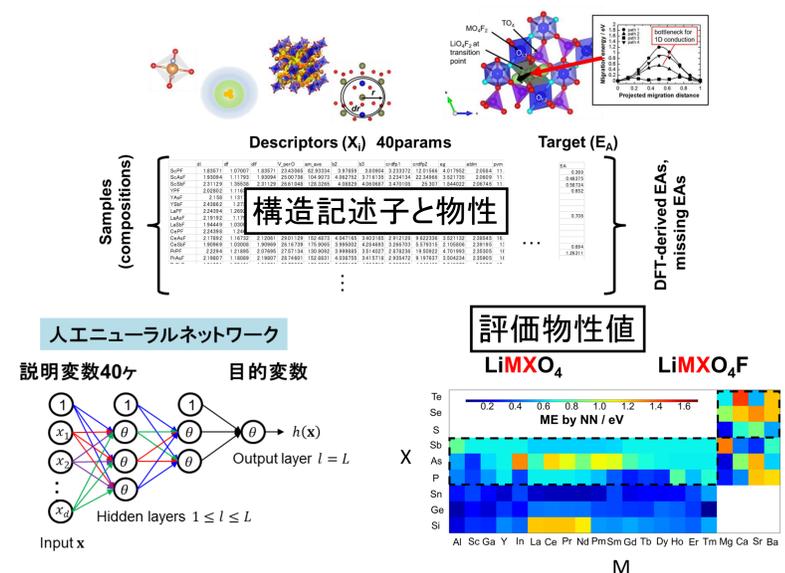
例: 粒界の界面エネルギーインフォマティクス評価



例: 第一原理MD法による電解液材料探索・DB構築



例: ニューラルネットワークによる物性評価



例: ハイスループット材料探索に向けた古典力場作成

