

AIによる活物質構造決定と特性制御

AI/MIが拓く電池材料開発

- 名古屋大学 特任教授 渡部孝、教授 齋藤永宏、客員准教授 高岸洋一、助教 蔡尚佑、研究アシスタント 文俊模、八名拓実、牟田幸浩
- トヨタ自動車(株) CPE 射場英紀
- (株)名城ナノカーボン 代表取締役 橋本剛、技術開発部長 橋本悟、事業開発部長 高野慶、研究員 西脇祐太、山口貴司
- あいちシンクロトロン光センター 主席研究員 渡辺義夫、特別フェロー 竹田美和

概要

①二次電池材料である活物質や固体電解質の表面／界面構造解析と特性予測

古くて新しい課題である炭素系活物質表層構造の決定とLi⁺伝導メカニズムの解明について低加速電圧による活物質表層TEM像の二値化とZ方向押し出しによるボクセル構造構築により得られた擬似3D構造を用いてモンテカルロシミュレーションを行うことで、図3の様にLi⁺の挿入経路・拡散挙動を明らかにした。本組合せによる解析は前例がなく新規性がある。さらに3Dプリンタを用いて炭素構造とLi⁺拡散の様子を模型として可視化した。今後様々な活物質について同様の解析を進め、トヨタ自動車の電池材料開発へフィードバックする。

②二次電池材料解析／特性予測用データベースの構築

トヨタ自動車や名城ナノカーボン等、企業提供のものや市販品の購入、名大で自作したものを合わせて350 試料程度の炭素材料について、XRD、顕微Ramman、SEM-EDS/TEM-EDS、TGA、ICP-M等、4万データ強(生データ、解析データ合わせ)となった。これまでこのような規模の機械学習/深層学習向けに整備した炭素材料のデータベースは存在しない。本データベースは商用利用のユーザーには料金を課す形式で運用予定。

③CNTによる低コスト・高性能導電補助剤開発

市場調査から中国で主流の電池用導電助剤は SuperP であることが判明。これに対抗するため、2)のデータを用いた機械学習・分類分けの結果を参考に、導電率の予測最高値に近い4試料を選択し、単独またはブレンドによる導電助剤として9種類のNCM811正極材シートを試作した。各々パウチ型のLIBセル試作による特性評価から、多層CNT(TCグレード) + 単層CNT(EC2.0-P)が SuperP の特性を凌駕する結果となった(図4参照)最も商品化に適しており、年度中の商品化を進めている。

本成果は機械学習を活用した電池材料開発のロールモデルに相当すると考えている。

特長

- ①数ナノスケールの炭素系活物質の実表層構造の可視化とLi⁺侵入経路の解析技術の確立により、長寿命化や急速充放電等、用途に応じた適切な活物質表層構造のプロセスコントロールが可能になる。
- ②世界で初めての4万データを超える炭素材料データベースを活用し、導電助剤等、新電池材料開発の指標が立てられる。