一緒なら、
見つかる
答えがある。

KRI
Your Innovation Partner

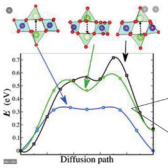
高イオン伝導体開発のためのAI解析技術
結晶構造から見た固体内イオン拡散現象の高速解析

新たな高イオン伝導体探索に向け、第一原理計算とAI解析技術を組み合わせた解析技術により物質内で起こるイオン拡散機構を高精度／高効率に把握します

結晶構造から固体内イオン拡散のメカニズムや現象の理解を深める

マクロな結晶構造モデルを用いた結晶内のイオン拡散経路を予測

- DFT計算による材料のイオン拡散性評価法
  ☞『構造最適化』+『Nudged Elastic Band(NEB)法』



活性化エネルギー

拡散係数

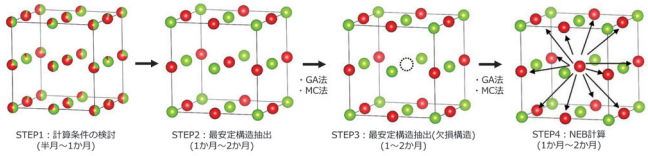
$$\sigma T = n\left\{\frac{z^2e^2d^2}{\alpha k} f_0 exp\left(\frac{\Delta S_m}{k}\right)\right\} exp\left(-\frac{\Delta H_m}{kT}\right)$$

Nernst-Einsteinの式およびRandom Walk理論によるイオン伝導率(σ)

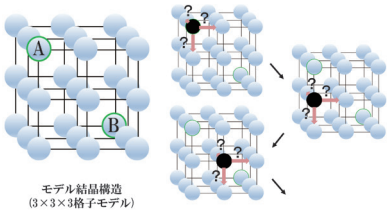
- NEB法を用いた評価の技術的な問題点
  - ・初期～最終状態の局所的な状態変化を評価
    (予測活性化エネルギー≠バルク特性)
  - ・バルクでの拡散性評価には多数の拡散経路を考慮
    ⇒全計算するには膨大な計算時間が必要

結晶モデルを用いたイオン拡散性と拡散経路の評価

一般的なDFT計算を用いたイオン拡散性評価法



イオン拡散性評価および拡散経路解析における技術的問題点

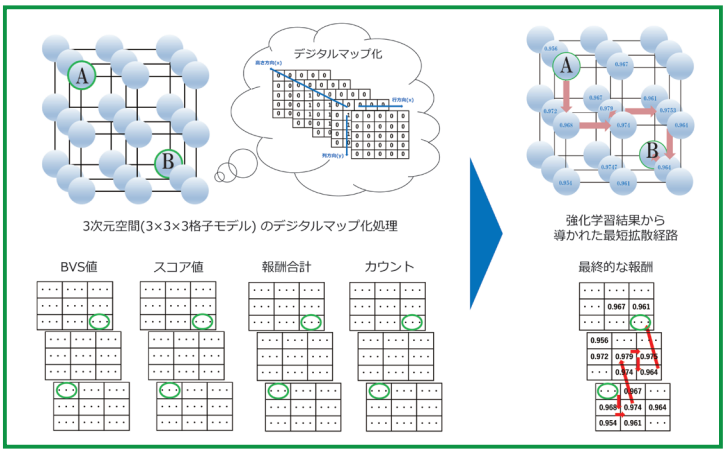


«拡散経路 全通り計算の場合»

3^3個の構造最適化計算(欠損構造)
+
6×90通りのNEB計算
⇓
567回のDFT計算処理が必要

KRI 独自開発の経路探索アルゴリズムを用いたイオン伝導性評価

3 次元実空間のデジタルマップ化処理と強化学習による最短拡散経路探索



Bond Valence Sum法と強化学習を組み合わせたキャリア拡散経路解析手法

Bond Valence Sum

$$\mathrm{BVS} = \sum_{i=1}^{n} exp\left(\frac{r_0 - ri}{B}\right)$$

BVS = *Bond Valence Sum*
r_0 = Parameter for the bond
r_i = *distance of bond*
B = *Bond Valence Parameter*

- **Keyword** ☞『固体内をどのようにイオンが拡散するか？』

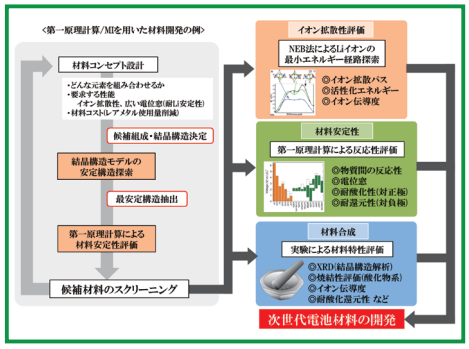
◎BVS法と強化学習を組合せて最適な拡散経路を予測

イオン拡散に適した結晶構造を持つ材料探索が可能
- ・結晶学的に安定でイオン拡散しやすい物質
- ・バルク内に短いイオン拡散経路がある結晶構造

実験系と非実験系が融合した次世代ハイブリッド型材料開発スキームの構築

KRIが保有する材料開発技術とインフォマティクス技術の融合により材料開発の効率化と加速を実現

「理論科学」「データ科学」「計算科学」など様々な技術を独自の方法で融合、構築し従来よりさらに高速／大量に材料スクリーニングが可能に
KRIが所有する材料開発技術や知見と共に、新しい技術を積極的に取り入れた独自開発の材料開発手法を活用し、お客様が求められるニーズに沿った次世代の材料開発支援を行ってまいります



株式会社 KRI　次世代電池研究部　tel：075-315-9259　mail：kri-energy@ml.kri-inc.jp