

高ガス溶解度、高ガス拡散係数、 金属への低い吸着性を併せ持つイオン液体の探索

株式会社デンソー 森 穂高

目的 イオン液体は100℃よりも十分に低い融点をもつ熔融塩であり、低い蒸気圧、液体となる広い温度範囲、高い化学的・熱的安定性、広い電気化学的電位窓、不燃性、高イオン導電率、そして様々な有機・無機材料との良好な溶解性といった特徴を持つ。これらの特徴を生かし、電池の電解質としての検討が進められている。イオン液体は構成イオンの大多数が有機イオンであるため、カチオンとアニオンの選択により物性や機能をデザインできる。しかし、そのデザインバリエーションの豊富さに対し、実験によるトライ&エラーで探索できる範囲はごくわずかであり、有望な未発見のイオン液体が存在する可能性がある。本利用ではMDシミュレーションと機械学習を用いて高ガス溶解度、高ガス拡散係数、金属への低い吸着性を併せ持つイオン液体を探索することを目的としている。

内容 本利用ではイオン液体探索のためのイオン液体中のガス拡散係数、ガス溶解度、電極への吸着エネルギーの教師データ生成を行った。MDシミュレーションのソルバーとしてLAMMPS、ガス溶解度の評価のための自由エネルギー解析にERmodを用いた。これらのソルバーをエンジンとした自動シミュレータを開発した。

結果 合計で約500水準のガス拡散係数、ガス溶解度等のデータを生成することができた。本教師データを用い、探索を行い、いくつかの候補物質を得た。

利用した計算機 OCTOPUS
 38460ノード時間