

リチウムアルミニウムチタンリン酸塩の 機械学習支援焼結プロセス

SATテクノロジー・ショーケース2024

■ はじめに

昇進する温室効果ガス排出に駆動される、緑のエネルギー源への需要の高まりは、持続可能な技術の推進の緊急性を強調しています。固体電池(SSB)は、液体の対照物に比べて優れたエネルギー密度、長寿命、および強化された安全性を提供し、これによって電気自動車やスマートデバイスなど幅広い用途に非常に適しています。

特にセラミック電解質を組み込むSSBの効率的な製造は、通常焼結に必要な高温および高圧の条件からくる重要な課題です。この研究では、冷間焼結プロセスを最適化するための機械学習アプローチを紹介し、これによって従来の焼結方法に関連する特性の損失を軽減し、高密度のセラミック電解質を低温で得ることができます。

さらに、冷間焼結プロセスを最適化するためにベイズ最適化戦略を採用しました。この機械学習技術によって、理想的なプロセスパラメーターを効率的に決定し、実験の回数を削減しました。また、このプロジェクトでは類似したシステムからのデータの統合も試みられ、適した電解質の開発を加速させました。

■ 活動内容

1. 方法論

実験手順は、リチウム・アルミニウム・チタン・リン酸塩(LATP)粉末と水を混ぜてセラミックスラリーを作成し、水分含有量を変えました。この混合物は後で400°C未満の温度で焼結されましたが、温度、圧縮荷重、焼結時間などのパラメーターを調整しました。ベイズ最適化は、高いイオン伝導率を達成するための最適な入力パラメーターを特定するために使用され、少量の基本データセットを利用しました。モデルは反復的に新しい実験を提案し、得られたイオン伝導率に基づいてフィードバックループを行いました(図1)。

2. 結果と考察

焼結されたLATP電解質のイオン伝導率はインピーダンス分光法で評価されました。驚くべきことに、第4の反復

で、 10^{-4} S/cmの秩序で優れたイオン伝導率が達成されました。SEM画像はさらなる洞察を提供し、第4の反復からのペレットはより高い緻密化と低い多孔性を示しました。

3. 結論

ベイズ最適化の適用により、低温焼結のための最適なパラメーターが迅速に特定され、LATPのイオン伝導率が大幅に向上しました(10^{-4} S/cm)。さらに、この研究は異なる実験条件のデータを使用して機械学習モデルをクロスレーニングする可能性を示し、このアプローチの柔軟性と適応性を示しました。この作業は、SSBの効率的な製造に向けた重要な一歩であり、持続可能なエネルギー解決策の前進に貢献します。

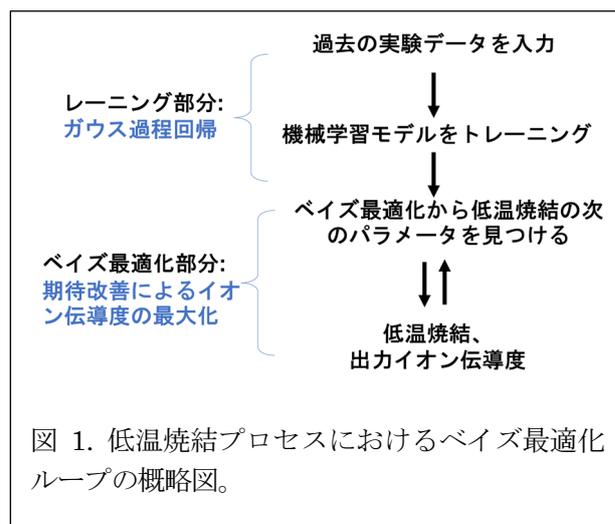


図 1. 低温焼結プロセスにおけるベイズ最適化ループの概略図。

代表発表者 RAJAPRIYA Navin(ラジャプリヤ ナヴィン)
所属 国立研究開発法人産業技術総合研究所
極限機能材料研究部門
問合せ先 〒463-8560 名古屋市守山区桜坂4-205
TEL: 052-736-7095
メールアドレス: navin.rajapriya@aist.go.jp

■キーワード: (1)ベイズ最適化
(2)低温焼結
(3)リチウム・アルミニウム・チタン・リン酸塩(LATP)
■共同研究者: 申ウソク, 濱本孝一
所属: 産業技術総合研究所
極限機能材料研究部門