

## 【MI-6株式会社】キシダ化学と共同でマテリアルズ・インフォマティクスの有効性を確認

～ 《東京大学津田研究室、三井物産の協力により難燃性電解液の開発に成功》 ～

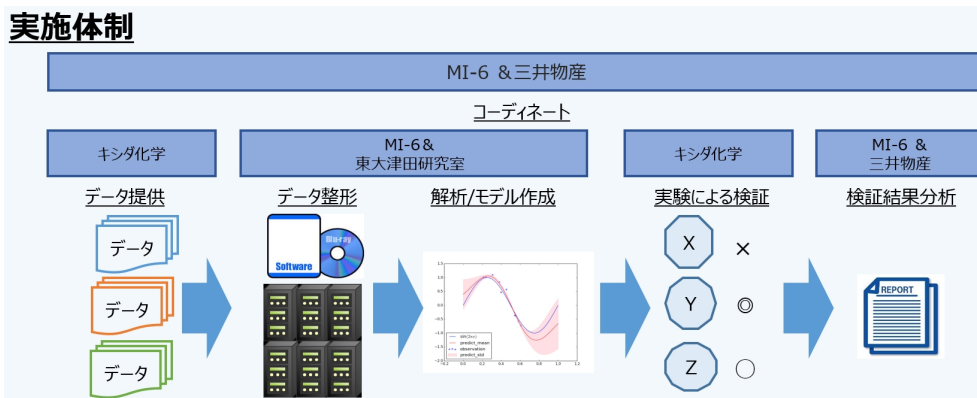
マテリアルズ・インフォマティクス※1（以下MI）を活用した材料開発支援サービスを行うMI-6株式会社（本社：東京都港区、代表取締役：木寄 基博）は、キシダ化学株式会社（本社：大阪市中央区、代表取締役：岸田 充弘）と共同で、東京大学津田研究室※2、三井物産株式会社の協力を得て、リチウムイオン電池の性能向上のための電解液※3組成予測にMIを活用し、電池の性能発現に有効な難燃性電解液組成の発見に至りましたので、お知らせします。

この結果はMIによる材料開発期間短縮の有効性を改めて示すものと考えられます。

※1 マテリアルズ・インフォマティクス（MI）：情報技術と材料科学を融合し、新素材や代替材料を探索する技術手法

※2 東京大学大学院 新領域創成科学研究科メディカル情報生命専攻 津田教授研究室

※3 電解液：リチウムイオン電池を構成する4つの主要材料の1つ（正極、負極、セパレータ、電解液）



### 取組の背景

・MIについて

素材産業は従業員数約120万人、付加価値額約20兆円を誇る日本のリーディング産業です。しかし新興国メーカー参入と積極的な投資等によって世界市場シェアは低下しており、イノベーションの高度化が求められています。[\*1]

マテリアルズ・インフォマティクス（Materials Informatics）とは「実験」「理論」「計算科学」に次ぐ第4の科学手法である「データ科学」を使って、短期間かつ低コストで新たな物質・材料を探索、開発する技術です。[\*2]

MI-6株式会社はMIを活用した素材産業の更なる発展を目指し、2017年11月にバイオインフォマティクスや情報学に携わってきたメンバーが中心となって設立された企業です。

[\*1] 経済産業省「素材産業におけるイノベーションの役割と期待」

[http://www.meti.go.jp/policy/mono\\_info\\_service/mono/chemistry/downloadfiles/180112materials-innovation.pdf](http://www.meti.go.jp/policy/mono_info_service/mono/chemistry/downloadfiles/180112materials-innovation.pdf)

[\*2] NIMS NOW Vol.16 No.2<2-3月号>

[http://www.nims.go.jp/publicity/nimsnow/vol16/hdfqf1000007bb0g-att/NN\\_JP\\_2016\\_no2.pdf](http://www.nims.go.jp/publicity/nimsnow/vol16/hdfqf1000007bb0g-att/NN_JP_2016_no2.pdf)

・電解液について

商用のリチウムイオン電池においては高容量化・高出力化といった各用途向けの性能追及と、これまで以上の安全性の両立が求められています。安全性に関わる懸念事項の一つとして、電解液の可燃性が広く認識されており、電解液を難燃化する材料の探索が長らく研究されてきましたが、電解液に配合が検討される多くの難燃剤は電池性能を低下させることが課題となっていました。

## 実施成果の概要

難燃剤配合による電池性能の低下を抑止するため、MIの技術を活用し、難燃剤を含まない場合と同様の電池性能を発現する新しい組成の難燃性電解液を設計しました。（次図）

1. キシダ化学が保有する実験結果データの物性値と電池性能の相関性を算出
2. 化合物ライブラリーに対してベイズ最適化※3を行い、推薦度の高いものを抽出
3. 最も推薦度の高い物質を電解液に適用し、検証

最も推薦度の高い物質を用いて設計した電解液の性能評価を行ったところ、初期データとして用いた電解液組成を上回る性能を示し、有望な難燃性電解液を開発することができました。

※3 ベイズ最適化：形状が分からない関数の最大値（または最小値）を求めるための手法



## 今後の展望

本実験により、企業データをMIへ適用することが材料開発に有効であると確認できました。MIは、電子材料、機能性素材、スペシャリティケミカル、塗料、接着剤、樹脂、コンパウンド、肥料、農薬、基礎化学品、無機原料などあらゆる材料開発を効率化すると期待されます。

MI-6は今後もキシダ化学、三井物産と協力してMIの研究開発と推進、普及に取組み、国内企業の開発力の維持向上や生産性の改善に資する取組を行い、国内素材産業の更なる発展に貢献して行きます。

## MI-6株式会社について

会社名：MI-6株式会社 / MI-6 Ltd.

所在地：東京都港区海岸1丁目2番3号汐留芝離宮ビルディング21階

代表者：木寄 基博

設立：2017年11月17日

URL：<https://mi-6.co.jp>

事業内容：MIを活用した材料開発の研究、開発支援、コンサルティング、プロジェクトマネジメント等

## キシダ化学株式会社について

会社名：キシダ化学株式会社 / KISHIDA CHEMICAL Co.,Ltd.

所在地：大阪府中央区本町橋3番1号

代表者：岸田 充弘

設立：1941年（昭和16年）6月7日

URL：<http://www.kishida.co.jp/com/index.html>

【お客様からのお問い合わせ先】

MI-6株式会社 営業担当 e-mail：[kzk@mi-6.co.jp](mailto:kzk@mi-6.co.jp)

【本リリースに関する報道お問い合わせ先】

MI-6株式会社 広報担当 e-mail：[pr@mi-6.co.jp](mailto:pr@mi-6.co.jp)

MI-6株式会社のプレスリリース一覧

[https://prtimes.jp/main/html/searchrlp/company\\_id/34072](https://prtimes.jp/main/html/searchrlp/company_id/34072)