

第1節 リチウム空気二次電池の開発動向

(国研)物質・材料研究機構 久保 佳実

はじめに

空気電池は、空気中の「酸素」を正極活物質とする電池であり、エネルギー密度が非常に高いのが特徴である。中でも、リチウム金属を負極活物質とするリチウム空気電池は、あらゆる電池の中でエネルギー密度が最高となる「究極の二次電池」として知られている。リチウムは酸化還元電位(電極電位)が最も低い「卑な」金属であるため、それを負極に用いることは電池電圧を高くする上で有利である。また、リチウムは原子番号3の最も軽い金属であるため、負極活物質の重量は非常に軽くなる。正極活物質の酸素も空気中から取り入れるため、あらかじめ電池の中に保持する必要がなく、その重量自体も非常に軽い。その結果、この両者を組み合わせたリチウム空気電池は、活物質重量が従来のリチウムイオン電池(LIB)の1/10以下になり、重量エネルギー密度が格段に向上する。リチウム空気電池内部の活物質(リチウム金属)に対する電池容量は3,860 mAh/gであり、電圧2.7 Vを掛けたエネルギー密度は10,000 Wh/kg以上になる(酸素を取り込んだ放電状態の Li_2O_2 に対しては1,170 mAh/gおよび3,100 Wh/kgとなる)。実際の電池重量には他の部材の重量も加わるため、電池全体としてのエネルギー密度は通常1/3程度になるが、仮に1/10としても1,000 Wh/kgとなり、現状のLIBの理論限界(~250 Wh/kg)より数倍大きい。リチウム空気電池は圧倒的に軽量で大容量な電池だといえる。図1にエネルギー密度に関する開発ロードマップを示す。

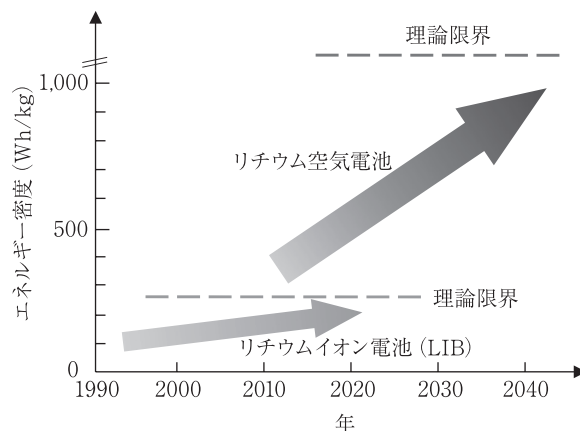


図1 リチウム空気電池のエネルギー密度に関する開発ロードマップ

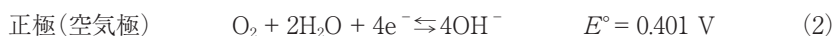
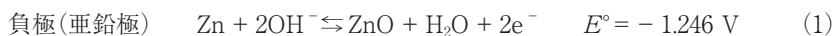
見 本

第2節 亜鉛空気二次電池の開発動向

東京工業大学 池澤 篤憲

はじめに

亜鉛空気二次電池は正極活物質として空気中の酸素，負極活物質として金属亜鉛を用いる二次電池である。電解液には主にアルカリ水溶液が用いられる。充放電反応式は下式のように表される(右向きが放電反応となる)。



放電時に、負極では金属亜鉛が酸化され酸化亜鉛が生じ、正極においては空気中の酸素が還元され水酸化物イオンが生じる。また、充電時にはこの逆反応が生じる。正極において酸素の酸化還元反応、負極において金属の酸化還元反応が生じる点ではリチウム空気二次電池と同様である。しかし、亜鉛空気二次電池では、負極の放電生成物(酸化亜鉛)が固体として蓄積する点(リチウム空気二次電池では正極の放電生成物(Li_2O_2)が固体として析出する)と正極活物質である酸素が4電子還元される点(リチウム空気二次電池では酸素は2電子還元される)が異なる。亜鉛空気二次電池の構成の模式図は図1の通りである。正極はカーボン、触媒、バインダー(ポリテトラフルオロエチレン(PTFE))からなる二層構造のガス拡散電極である。電解液には濃厚アルカリ水溶液が用いられることが多い。負極は活物質である亜鉛/酸化亜鉛、バインダー(PTFE, スチレンブタジエンゴム(SBR), カルボキシメチルセルロースナトリウム(CMC), ポリフッ化ビニリデン(PVdF)など)、

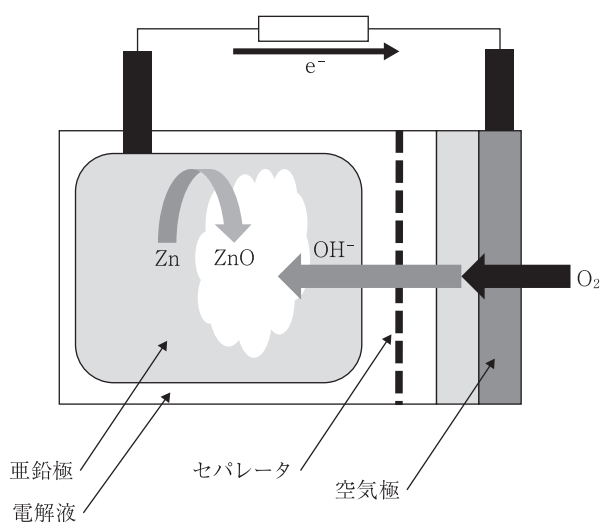


図1 亜鉛空気二次電池

第3節 水素/空気二次電池の開発動向とFDK(株)の 量産化に向けた取り組み

FDK(株) 安岡 茂和

はじめに

水素/空気二次電池は、負極に水素吸蔵合金、正極にガス拡散電極(空気極)、電解液にアルカリ水溶液を用いた電池であり、一般的にニッケル水素電池と呼ばれるニッケル金属水素化合物二次電池のニッケル正極を空気極に代えた構成を取る。電池容量については、空気極では、大気中の酸素を活物質として利用するため、負極の容量に依存するが、ニッケル水素電池に比べて高エネルギー密度が期待できる電池であるといえる。本節では、この電池の概要とこれまでの開発状況を述べるとともに、当社らの研究グループでの取り組み状況を紹介する。

1. 空気電池の二次電池化の課題

空気電池は、補聴器用や災害時の非常電源用として、負極に亜鉛やマグネシウムを用いた一次電池が既に商品化されている。しかし、充放電を繰り返す空気二次電池については、一般的には商品化されていなかった。空気電池の二次電池化に向けては、正極(空気極)の開発及び負極の選択という、大きく二つの課題がある。

空気極の放電反応は、空気一次電池や燃料電池とほぼ同じであるが、二次電池化に向けては充電反応を考慮する必要がある。空気極の充電反応は酸素発生を伴う酸化反応であるが、燃料電池で多く使用されているPt担持カーボンは、カーボンが酸化される等の問題があり、充電に耐えられる空気極の開発には至っていない。また、商品化されている亜鉛空気一次電池は、放電時の抵抗が大きいため消費電流が小さく、小型の補聴器用等の限定した用途でしか使用されていない。二次電池として使用する場合、電池の抵抗が大きいと充電時と放電時の電圧差が大きくなり、Whでのエネルギー効率が悪くなるため、改善が必要である。

一方、負極は二次電池で研究されている材料と共通であるが、Li、Mg、Ca、Zn等の金属材料はZnを代表とするデンドライトでの短絡の問題に加えて、正極中に析出して反応ガスの拡散の流動を抑える、いわゆるプラグギングが生じて正極の反応を阻害する問題があり実用化には至っておらず、亜鉛空気電池の二次電池化は長年実用化されていなかった。これらの金属負極材料は充放電中に溶解析出反応を伴うため、化学的な反応そのものを変えない限り、いつまで

第4節 アルミニウム空気電池の二次電池化の検討

富士色素(株) 森 良平

はじめに

リチウムイオン電池に代わる次世代の二次電池の一つの有力な候補として金属空気電池があるが、その中でも大きな電池容量を有する、豊富な資源量、安全性、コストが安くなる、大気中で簡単に製造できる可能性がある候補としてアルミニウム空気電池がある。本節では、イオン液体系の電解液を用い、電極材料などを検討することにより、副生成物が生じない高性能なアルミニウム空気電池を作成することができたので報告する。

近年、昔に比べて夏は異常に暑くなり冬も暖かくなってきており、現在の地球は過去1,400年で最も暖かくなっている。この地球規模で気温や海水温が上昇し氷河や氷床が縮小する現象、すなわち地球温暖化は、平均的な気温の上昇のみならず、異常高温、熱波、大雨、早い春の訪れによる生物活動の変化、水資源や農作物への影響など、自然生態系や人間社会にすでに現れている。将来、地球の気温はさらに上昇すると予想され、水、生態系、食糧、沿岸域、健康などでより深刻な影響が生じると考えられている。地球温暖化の最大の問題は、水や食糧が世界的に不足してくることである。2025年には世界人口の大半にあたる約50億人が水不足になると予測されている。また、今後100年以内に、中国で米の収穫は8割減、ブラジルやインドでは小麦などの収穫が大幅に減少するなど、深刻な食糧不足が警告されている。さらに植物への影響も大きく、森林の消滅や生物種の絶滅、50年後にはアマゾンの森林は砂漠化するなどの予測もある。地球温暖化の原因はメタンや二酸化炭素(CO₂)など温暖化ガスの急増である。このような事実から今後はエネルギーを石油などの化石燃料に依存することが難しく、例えば自動車のCO₂排出を抑制すべく自動車のエコロジー化が加速度的に進んでいる。現在主流のハイブリッドカーを含め、電気自動車用蓄電池、燃料電池の開発に、自動車会社を含めた様々な企業が乗り出している。また、スマートホームにおける電気エネルギーの二次電池能力の向上なども開発のターゲットとなっている。環境問題への関心の高まりに伴い、地球環境にやさしいリチウムイオン二次電池は、今後急速な普及が見込まれている電気自動車やハイブリッド自動車用途の他、風力や太陽光発電システムの電力貯蔵用としても注目され開発が進められている。エネルギーの有効利用、低炭素社会に向けて、大容量二次電池は、小型機器から大型機器まで幅広い分野での適用が可能である。

第1節 グラフェンを用いた正極の開発

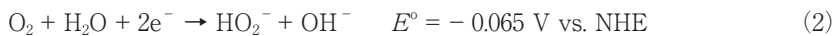
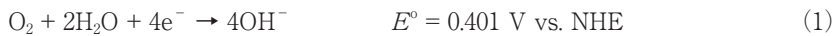
近畿大学 湯浅 雅賀

はじめに

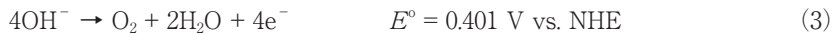
金属空気電池は空気中の酸素を正極とした電池であり、空気極において酸素の電気化学反応（酸素還元反応と酸素発生反応）が起こる。この空気極での電気化学反応における過電圧をいかに抑制できるかが、金属空気電池の出力向上と充放電効率向上の鍵となる。また、充放電における材料の安定性も重要である。本節では、安定に動作する酸素還元酸素発生二元機能空気極としてグラフェンを検討した研究について紹介する。

1. 空気極の構成

金属空気電池の正極では、放電時には酸素還元反応



が、充電時には酸素発生反応



が進行する。上記の式(3)の酸素発生反応は電極-電解液の二相界面で起こる。一方で、式(1)および式(2)の酸素還元反応は、気体(O₂)-液体(H₂O)-固体(e⁻を供給)の三相界面で起こるため、空気極には平板電極ではなく、三相界面形成に有利なガス拡散型電極が用いられる。ガス拡散型電極は多孔構造の電極であり(図1)、細孔内に電解液と気体が混在することで多数の三相界面が形成される(電極反応層)。この層には高い電子導電性と疎水性を有し、かつ高比表面積なカーボンブラックに、電極触媒を担持した材料がよく用いられる。電極触媒としては、金属、金属酸化物、金属窒化物、金属硫化物、遷移金属ポルフィリン錯体などこれまでに数多く報告されており(表1, 表2)、現在も研究が進められている。電極反応層の外側(空気側)には、電解液の空気側への漏洩を防ぐために、ガス透過性が良い比較的低比表面積なカーボンブラックにポリテトラフルオロエチレン(PTFE)を添加して形成した、ガス供給層が配置される。

第2節 カーボンナノチューブを用いた正極の開発

(国研)物質・材料研究機構 野村 晃敬

はじめに

リチウム空気電池において正極は、大気酸素を吸収して放電し、充電によって酸素を排出する機能をもつ電極である。大気中の酸素をやり取りする電極であることから、空気極とも呼ばれる。空気極では、吸収した酸素の還元反応(具体的には $2\text{Li}^+ + 2\text{e}^- + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{Li}_2\text{O}_2$ と表される)が起こる。空気極はこの電気化学反応を支配してリチウム空気電池のセル特性を大きく左右する。リチウム空気電池において電池活物質はリチウムと大気酸素であって、空気極自体は電池活物質をもたない。しかし、空気極は電池反応が起きる場を与え、その反応をコントロールすることで電池特性に大きな影響を与える重要な電池材料である。

この空気極を構成する材料の要件としては、他の電池の電極と同様に、十分な導電性があり、電気化学的に活性な表面を多くもっている必要がある。すなわち導電性が高く大きな比表面積をもつ材料でなければならない。同時にリチウム空気電池の空気極においては、大気から酸素ガスを吸収し、固体の放電生成物(過酸化リチウム, Li_2O_2)が空気極に析出する現象を加味した材料設計が要請される。つまり放電が進むにつれて析出していく放電生成物を蓄積して内包できる空間を含み、かつ酸素の拡散とイオンの輸送を妨げない連結した空孔構造をもつことが望まれる。以上のような要求をまとめると、高表面積であって高空孔な、導電性のスポンジのような構造が求められる。空気極にはこのような空孔構造を要求される点が他の電池電極設計とは大きく異なる。

そのような空気極の材料として検討されているのがナノ構造をもつカーボン材料である。これまでに多様なナノカーボン材料、具体的には、カーボンブラック、グラフェン、カーボンゲル、カーボンファイバー、カーボンナノチューブ(CNT)などが空気極材料候補として検討されてきている。これらのナノカーボン材料は高い比表面積をもち、カーボン重量当たりで見ればかなり大きな放電容量、例えば $10,000 \text{ mAh/g}_{\text{carbon}}$ を超える放電容量が得られる空気極をつくることができている。ところが、こうしたナノカーボン材料を電極として有効に固定できるのはせいぜい 1 mg/cm^2 ぐらいが限度である。そのため電極面積当たりで見ると、得られる放電容量は大きくても 10 mAh/cm^2 程度が限界である。カーボン重量当たりの容量($\text{mAh/g}_{\text{carbon}}$)はナノカーボン材料そのものの容量特性を評価する指標として用いられるが、電池材料の開発においてはセルを組んで実際に使える容量を比較することが重要であり、電極面積当たりの容量

第3節 異種元素含有カーボンを用いた正極材の開発

芝浦工業大学 石崎 貴裕

はじめに

近年、スマートフォンやモバイルPC等のスマートデバイスの発展に伴い、デバイスの消費電力が増加しているため、高いエネルギー容量を有する電池が求められている¹⁾。このため、現行のリチウムイオン電池の性能を高める研究が多く行われている。しかし、リチウムイオン電池のエネルギー容量は限界値に近づきつつあり、新たなエネルギーデバイスの研究開発が行われている。この中で、新たな二次電池として注目されているのがリチウムを利用した金属空気電池である¹⁻³⁾。金属空気電池はリチウムイオン電池と同様に3層構造を有する電池であるが、負極活物質、電解質、空気極により構成されており、空気極では、酸素の還元反応(ORR: Oxygen Reduction Reaction)を利用する。金属空気電池では、電池内部に充填する活物質が負極活物質のみになるため、電池のエネルギー容量を飛躍的に向上させることが可能である。金属空気電池としては、亜鉛空気電池が補聴器等の電源として実用化されている⁴⁾。金属空気電池は、ORRと金属の酸化反応のエネルギー差が起電力となる。ORRには、下記式(1)のように4電子反応が発生し、最終生成物が直接生成するものと、式(2),(3)のように2段階の2電子反応を経由して最終生成物となる2種類の経路がある。



ORRの反応速度は非常に遅いため、反応を促進するための触媒が必要である。ORRに対して高い触媒活性を有する材料として、Pt系触媒がある⁵⁻¹⁰⁾。しかし、Ptは希少性の高さが高い需要等によりコストが高くなるため、その使用量の削減が求められている。また、Pt系触媒は2電子反応で発生する HO_2^- イオンの高い酸化力により、触媒自体が影響を受けてORR活性を有する反応サイトが減少することや長期安定性に難があるという問題も抱えている。このため、金属空気電池の実用化には、Pt使用量の削減やPtフリーの触媒材料の開発が急務である。Pt代替触媒材料の候補として、合金系触媒、カーボン触媒、カーボンと合金の複合触媒等が挙げられる¹¹⁻²⁰⁾。しかし、触媒材料に金属を用いる場合、重量エネルギー密度が減少してしまうことやコストが高くなることが欠点になる。このため、メタルフリーの触媒材料の開

第1節 リチウム空気二次電池用電解質および添加剤の開発動向

(国研)物質・材料研究機構 松田 翔一

はじめに

蓄電デバイスとして広く利用されているリチウムイオン電池は、既にその理論限界のエネルギー密度に迫っており、そのエネルギー密度は400 Wh/kg程度が限界と推測されている。そのため、リチウムイオン電池よりも高いエネルギー密度を可能とする、次世代蓄電池に関する研究が近年盛んである。リチウム空気電池は、高い還元力を有する金属リチウムと、大気中の酸素を活物質として利用するため、リチウムイオン電池の2～5倍以上のエネルギー密度を実現することが可能であり、次世代蓄電池の最有力候補である^{1,2)}。実際に、700 Wh/kgを超えるセルも既にも実証されており、リチウム空気電池の有する高いエネルギー密度の潜在能力は非常に魅力的である^{3,4)}。リチウム空気電池は、正極の多孔性カーボン電極、セパレータ、電解液、負極の金属リチウムを積層した単純な構造である点や、貴金属などを用いずに安価な材料で構成される点も次世代蓄電池として有望な理由として挙げられる。一方で、サイクル数、パワー密度は、現行のリチウムイオン電池に比べて低い性能にとどまっており、電池性能を向上させるための材料開発が急務である。特に、リチウム空気電池の二次電池化に向けては、電解質の安定性に対する要求は高い。リチウム空気電池用電解質には、正極での酸素活性種に対する高い酸化耐性と、負極における金属リチウムに対する高い還元耐性の両立が求められる。しかしながら、一般的に溶媒は酸化耐性が高ければ還元耐性が低く、逆に還元耐性が高ければ酸化耐性は低い。そのため、リチウムイオン電池と同様に、添加剤などを利用することで副反応を速度論的に抑制し、正極・負極両反応における可逆性向上を目指す戦略が必要となる。本節では、電解質の開発動向について溶媒選定の観点に焦点を当てて全体像を俯瞰する。その上で、添加剤の開発動向について紹介する。

1. 電解質の評価手法

リチウム空気電池では大気中の酸素を活物質として正極での充放電反応が進行する。放電反応においては、酸素が電気化学的に還元され、過酸化リチウム(Li_2O_2)が生成し、カーボン電極上に堆積する。

第2節 グライム系電解液の特徴と開発動向

成蹊大学 齋藤 守弘

はじめに

前節までに述べられたように、金属空気二次電池は現在市販の蓄電池のなかで最も重宝されているLiイオン電池(LIB)に対し、これを超えるエネルギー密度を示す可能性を有しており、昨今のIoT技術による電子デバイスの高機能化や車の電動化などの進化が著しい社会において益々期待が高まっている。とりわけ、Li空気二次電池(LAB)は化学物質を電極材料とする蓄電池のなかでも最も高い理論エネルギー密度を有しており、LIBの5倍以上の蓄電容量を示すと考えられている¹⁾。すなわち、実現すれば将来の『夢の電池』となり得る。我が国においても、LABについてはJSTの先端的低炭素化技術開発、通称ALCA SPRING事業にて官学一体になって研究開発に取り組んでいる。本節では、そのようなLABのキーマテリアルの一つである電解液として現状で最も広くかつ研究例も多いグライム系電解液の特徴と開発動向について、我々の研究グループが本事業において研究した成果を含めて概説し、紹介する。

1. 非水系LABのグライム系電解液

充電可能な非水系LABは、1996年にK. M. Abraham氏の研究グループが当初はプロピレンカーボネート(PC) 溶媒を含有したポリマーゲル電解質を用いた形で初めて提案した²⁾。その後、PCやエチレンカーボネート(EC)などのカーボネート系電解液をそのまま用いた構成が主流となり、放電容量も向上したように思われた。しかし、トヨタ自動車社の水野らの研究により、カーボネート系電解液は実際には放電時に生成した酸素ラジカル($O_2^{\cdot-}$)により分解し、これにより正極である空気極上には Li_2O_2 だけでなく Li_2CO_3 も生成していることが示唆された³⁾。また、使用する電解液によっては大量に Li_2CO_3 が生成することや、PCの分解機構なども提案している。その後、酸素溶解度が高く、比誘電率が比較的低いグライム溶媒($\epsilon = 7$ 程度)が $O_2^{\cdot-}$ に対する反応性が比較的低く、空気極への Li_2O_2 の析出および分解が放電サイクルを通じて確認できたことから、現在では図1に示すような、比較的蒸気圧と粘度のバランスのよいテトラグライム(G4)程度のグライム溶媒に、種々のアニオンを有するLi塩を溶解したグライム系電解液が多く使用されるようになっている。

第3節 金属/空気二次電池用固体電解質の作製と 全固体鉄/空気電池の構築

豊橋技術科学大学 松田 厚範 タン ワイ キアン

はじめに

地球環境保全の観点から、太陽光、風力、バイオマスに代表される再生可能エネルギーの活用が大きな課題となっている。これらの再生可能エネルギーを効率よく貯蔵し、電気エネルギーとして安定に供給するには、高性能な蓄電池の開発が不可欠である。現在の蓄電池の主役はリチウムイオン二次電池(LIB)であるが、電気自動車への搭載やスマートグリッドの用途に向けてはエネルギー密度が不足している。LIBの代替となる有力候補の一つが金属/空気電池である。金属/空気電池は、従来電池を凌ぐ高容量化が達成可能な電池として注目されているが、繰り返し使用可能な二次電池として作動させるには、高容量化や長期耐久性などの実用面の課題を克服する必要がある。また、高活性で安価な正極触媒の開発も重要な課題となっている。本稿では種々の金属/空気電池について概説し、特に我々が取り組んでいる鉄/空気電池の構築と全固体化について紹介する。

1. 金属/空気電池

金属/空気電池は亜鉛、アルミニウム、鉄、マグネシウム、リチウムなどの金属材料を負極側、空気中から取り込まれる酸素を正極側の活物質とする電池である。金属/空気電池の構成概略図を図1に示す。酸素は電池系外の空気から取り込まれるので、大部分に負極活物質を充填することができ、電気容量は負極容量のみで決まるため、容量密度とエネルギー密度が高いのが特徴である。最大の特長は活物質としての酸素を電池内に収納する必要がないことであり、半電池で作動できる。実際には正極には酸素を利用するための触媒層が必要であるが、それを考慮しても電池の大部分は負極活物質の収納に用いることができることから大きなエネルギー密度を引き出せる可能性を秘めている。表1に種々の金属/空気電池の負極反応と、理論容量、理論電圧および理論エネルギー密度を示す¹⁾。起電力や容量は負極金属の種類に依存することから、その金属の還元力、想定される価数変化、資源的制約などを考慮した上で、用途に合わせて使用する金属を選択できる。亜鉛を使う系は既に市販されており、補聴器用のボタン型一次電池として広く認識されている。しかし、充電による亜鉛電極の形状変化が大きく二次電池

はじめに

金属空気二次電池の最も大きな特徴は、空気中の酸素を正極活物質として利用する点にある。正極活物質を電池内に組み込む必要がないため、小型軽量化が可能であり、金属空気電池の中ではエネルギー密度が小さいとされる亜鉛空気電池でさえ、 350 Wh kg^{-1} 以上の実質エネルギー密度を有する二次電池の作製が可能である。一方で、金属負極のデンドライト成長および自己放電・不働態化の抑制、空気極の反応速度向上と過電圧低減、反応生成物の制御、電池全体のサイクル特性やクーロン効率の向上、安全性の向上など、まだまだ課題は山積している。特にセル構造の観点からは、放電時に生じる反応生成物を制御して、空気中の酸素を正極活物質として効率よく利用すると同時に、充電時に生じる酸素ガスの逃げ道を確保する必要がある、ガス拡散層と触媒層の積層化やオープンセル構造の利用が検討されている。本章では、金属空気二次電池の材料およびセル形状とスタック構造について記す。次世代の金属空気二次電池開発のための一助となれば幸いである。

1. 金属空気二次電池の材料・セル形状

金属空気二次電池の材料は、金属負極、電解液、多孔質正極(空気極)の3つに大きく分けられる。ここでは各種材料について述べる。特に電解液の種類とセル形状は大きく関連するため、電解液の項ではセル形状も合わせて解説する。

1.1 負極活物質

理論的には、酸素還元反応の電位(E_{O_2})と異なる値の酸化還元電位(E_M)を有する金属を用いれば、どんな組み合わせでも起電力は発生する。その起電力は $E_{O_2} - E_M$ となり、高エネルギー密度を有する金属空気二次電池を得るためには、なるべく E_M が小さく容量の大きい金属を使用することが好ましい。表1は、電池応用が検討されている各種金属の標準電極電位(標準状態における電極電位)を示

表1 各種金属の標準電極電位^{1,2)}

金属	標準電極電位 (vs. SHE)
Zn	-0.76
Al	-1.66
Mg	-2.37
Na	-2.71
Ca	-2.87
K	-2.93
Li	-3.05

見 本

工学院大学 廣澤 史也 宮川 雅矢 高羽 洋充

はじめに

マテリアルズインフォマティクス(MI)では、物質の基本データと観測データとの相関性を推論する。一般的な物質の基本データとしては、物性や分子構造などがあり、原子間の結合距離や角度、そして官能基の種類や配置などをパラメータとする。そのため、一分子構造からだけでも数千種類を超える異なる構造データ(記述子)を得ることができる。よって、相関性の確度に関してはサンプリングされたデータの空間的な広がりや質によって決まる。また、電子物性や発光物性、反応性など観測データの推論を目的とした場合では、分子構造よりも電子構造に関連する情報を記述子とした方がデータとしての質は高くなる。このとき、推論したいデータにダイレクトな情報を記述子として用いた方が、相関式の背後にある物理的な意味も捉えやすい。しかし、電子状態に関するデータを分子構造だけから推論するには限界があり、測定も簡単でない。そのため、インフォマティクスで必要とされる多数のデータを得ることは一般的に困難である。このとき、第一原理計算のような理論的なシミュレーション手法を用いて、非経験的に電子状態など構造から容易に計算することが難しい記述子を作成することが有用となってくる。

計算化学の種類としては、第一原理計算、密度汎関数法、分子動力学法、モンテカルロ法、粗視化動力学法などが知られているが、電子状態も計算できて幅広い材料に適用できる手法としては密度汎関数法が挙げられる。密度汎関数法は、シュレーディンガー方程式を電子密度の汎関数で表して電子相関を精度良く取り込んだ量子化学計算手法の一つであり、Hartree-Fock(HF)法などと比べて計算が高速だという利点がある。また最近の密度汎関数法プログラムでは、マルチコアやクラスター化されたコンピュータ性能を効率良く使って、数十から数百の構造を一気に計算し比較検討できるような機能をもつものがある。このような連続計算・連続解析機能は計算化学をMIに活用する上で重要である。また、状態も計算ができて幅広い材料に適用できる手法としては密度汎関数法が挙げられる。密度汎関数法は、遷移金属など多様な系を現実的な時間で計算できるため、幅広い材料に適用できる。さらに、最近のプログラムでは、スクリプトを使って数百の構造を連続計算するような機能がある。このような連続計算機能を利用することで、MIに計算化学をより容易に活用できるようになってきた。

このように計算化学技術は一般にMIと親和性がある。材料開発の指針を得るという計算化学の産業応用の観点から見ると、計算化学技術にMIを利用することで、複雑な解析モデルの構築を回避して、材料設計に必要な説明変数と目的変数の間に存在するもっともらしい回帰式