

2023 年度年次報告書

計測・解析プロセス革新のための基盤の構築

2023 年度採択研究代表者

木村 勇太

東北大学 多元物質科学研究所

助教

粒子集団の化学反応時空間ダイナミクスの情報計測基盤の構築

研究成果の概要

蓄電池などの(電気)化学デバイスの性能は、構成材料の特性だけでなく、構成材料粒子の集団的な(電気)化学反応とその動的変化すなわち、粒子集団の化学反応ダイナミクスにも大きく左右される。しかしながら、こうした粒子集団の化学反応の実測は難しく、その理解は遅れていた。本研究では、筆者らが開発してきた、コンピュータ断層撮影-エックス線吸収端近傍構造法を基盤とする 3 次元化学イメージング技術を用いて、蓄電池電極内の数千個の活物質粒子各々の反応挙動を、同時に、オペランド・3 次元で実測し、その大規模計測データを解析することで、集団的反応が生じるメカニズムを理解し、デバイス設計に活用する方法論を確立することを目指す。2023 年度は、全固体リチウムイオン電池合剤電極内の、均一粒径の活物質粒子集団の電気化学反応の計測とそのデータ解析を主に行った。正極活物質として平均粒径約 3 または 10 μm の $\text{Li}(\text{Ni}_{1/3}\text{Mn}_{1/3}\text{Co}_{1/3})\text{O}_2$ (NMC)を、固体電解質として $\text{Li}_{2.2}\text{C}_{0.8}\text{B}_{0.2}\text{O}_3$ (LCBO)を用いて作製した合剤電極を正極とする、モデル全固体電池を準備した。このモデル全固体電池を充電後、合剤電極内の 3 次元反応分布(Li 量分布)を計測した。観察領域は約 30 x 30 x 50 μm 立方、空間分解能は約 150 nm であった。観察領域内の数百個の NMC 粒子各々の反応状態と粒子体積の相関を分析したところ、NMC 粒子の粒径が大きくなるにつれて粒子内部で反応がより不均一になり、反対に粒径が小さくなるにつれて粒子間で反応が不均一になる傾向があることがわかった。各粒径における反応が均一/不均一な粒子の割合を調べることで、反応を均一に進行させる上で最適な NMC 粒子径を定量的に導出した。一連の解析により、上記の最適な粒子径は、Li の拡散係数などの活物質材料の特性だけでなく、粒子の分布など、集団の性質にも大きく依存することが明らかとなった。