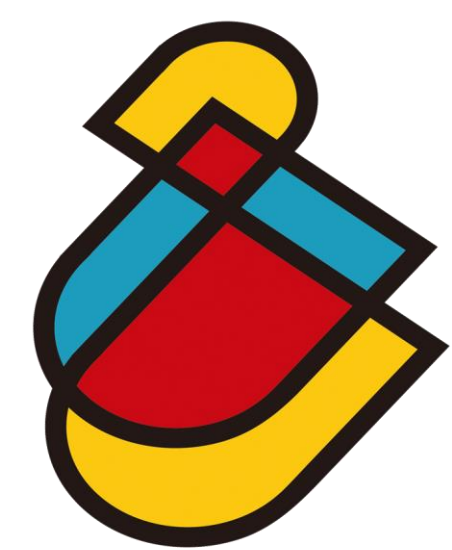




OPERA

第2回JST OPERAシンポジウム

「全固体電池のサイエンス構築に向けて」



Tokyo Tech

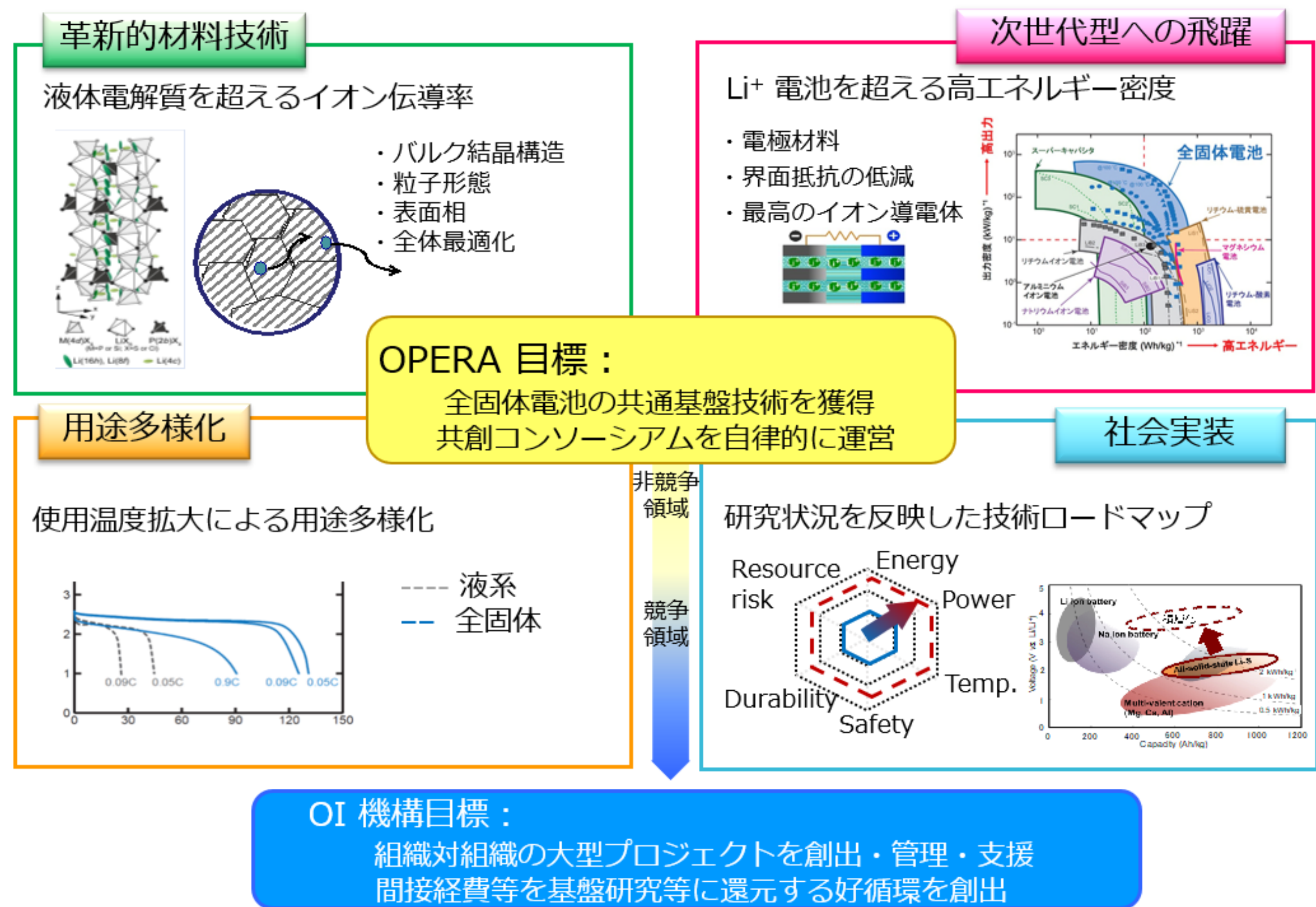
コンソーシアム名「全固体電池技術共創コンソーシアム」

研究者氏名・所属 菅野 了次・東京工業大学 科学技術創成研究院 全固体電池研究センター

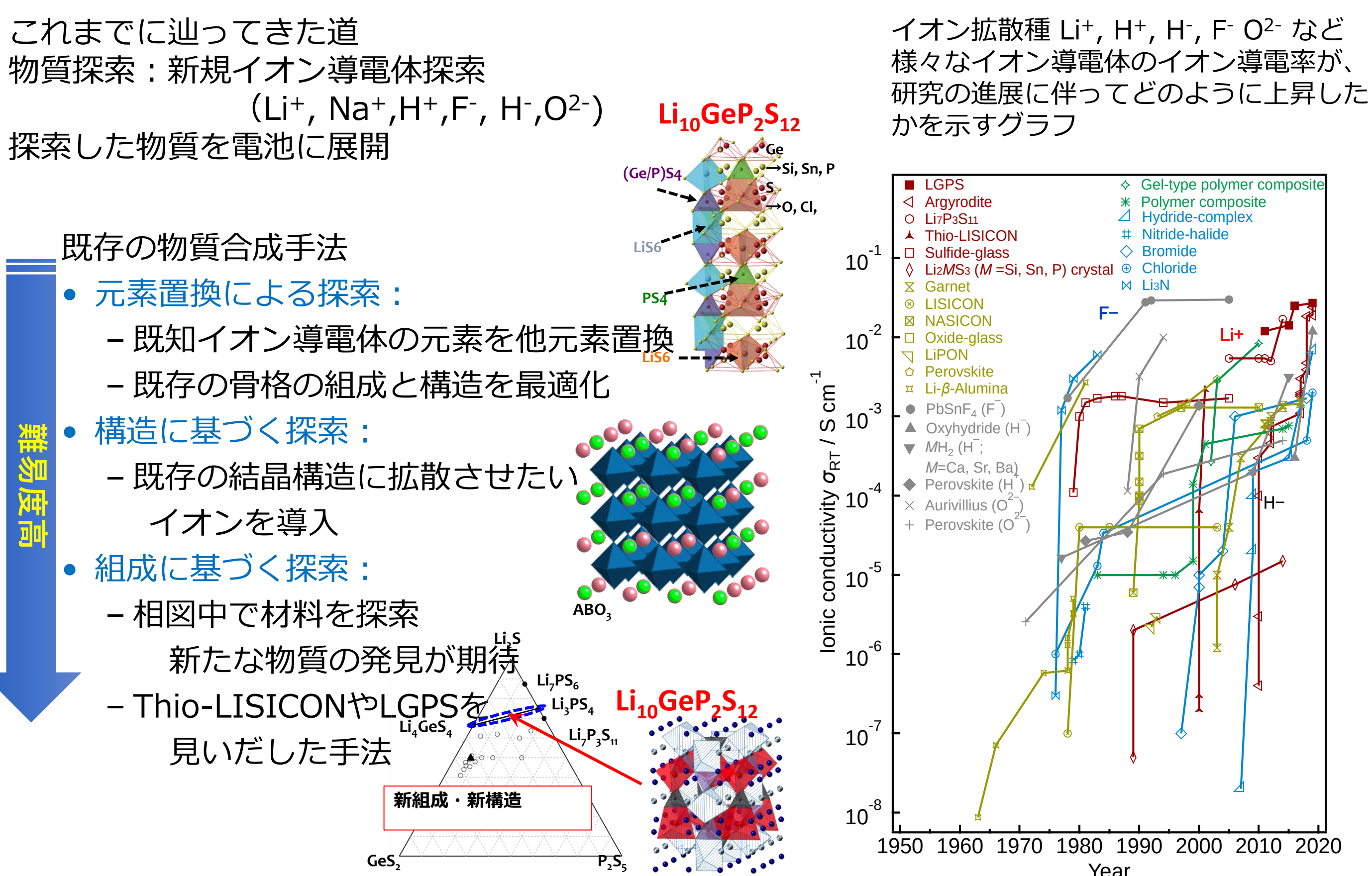
■緒言

情報化社会が進展してスマートフォンやタブレットなどの携帯情報端末が日常生活に不可欠なものになり、また電気自動車（EV）へのパラダイムシフトがグローバルに加速しています。これらには現在、液体の電解質を持つリチウムイオン電池などが利用されていますが、さらに安全性が高く、コンパクトで高性能な電池の開発が期待されています。菅野教授らが創り出した超イオン伝導体（固体電解質）は、固体中を高速でイオンが選択的に動き回り、かつ低温から高温まで幅広い温度領域で作動する新しい材料であり、液漏れもなく安全性や安定性にも優れ、重量あたりのエネルギー密度も高い、全固体電池のキーテクノロジーです。本コンソーシアムでは、超イオン伝導体の開発を世界的にリードしている技術優位性を活用し、全固体電池の実用化を促進するための研究を行います。

4つの研究課題



材料探索研究の過去・現在と未来：固体電解質探索



これからの新物質の見つけ方模索：理論計算やインフォマティクスと実験との融合

仮想空間での材料開発

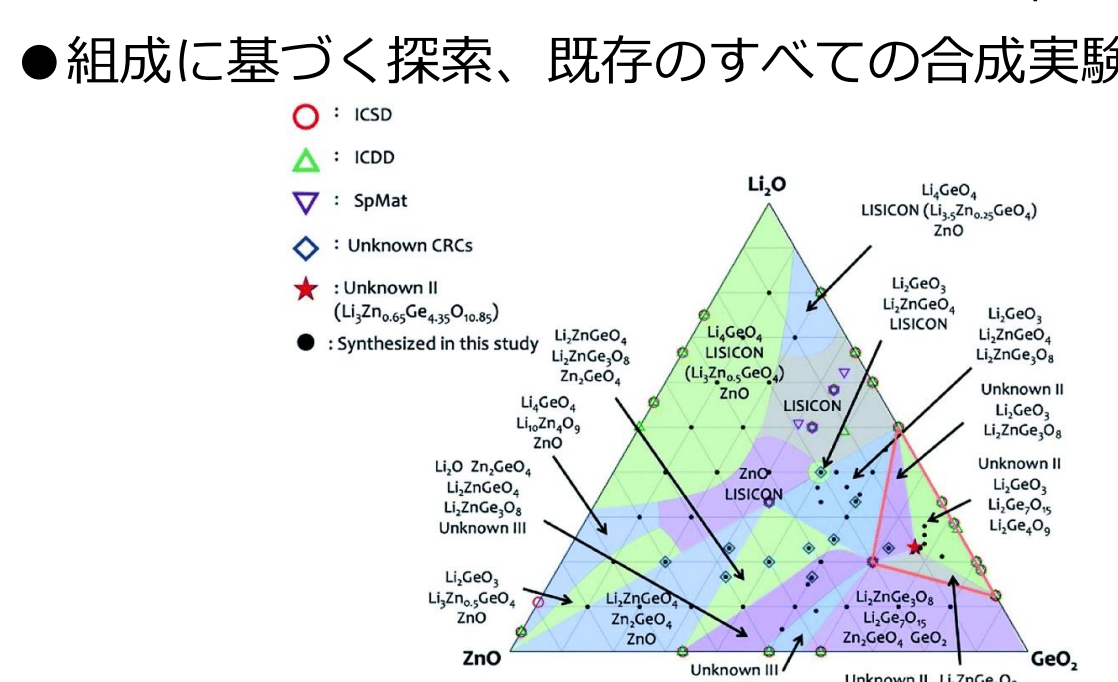
- 既知構造を基本、イオン高速拡散の構造的な特徴を抽出、無機結晶構造データベースからスクリーニング
- DFT-MD 計算：全組成を網羅的に計算して材料発見につながる可能性
 - 第一原理計算に基づく構造予測 (Nature Mater 14, 1026–1031, 2015.)
 - Lattice dynamicsに着目した探索手法 (Energy Environ. Sci., 2018, 11, 850)
 - 格子力学に基づくハイスループット物質探索 (iScience 16, 270–282, 2019)

実空間での材料探索との融合

- 古典的な物質合成が辿った手法の展開に類似していると考え
- 構造を基にした探索と、組成を基にした探索、相図を基にした探索として整理

●機械学習を導入して目的とする物性を予測

- 相図に基づく探索、LISICON のイオン導電率の予測を、回帰分析に基づく機械学習で行った例
- 推薦システムによる安定組成予測と、合成化学の観点（元素選択）の組み合わせ

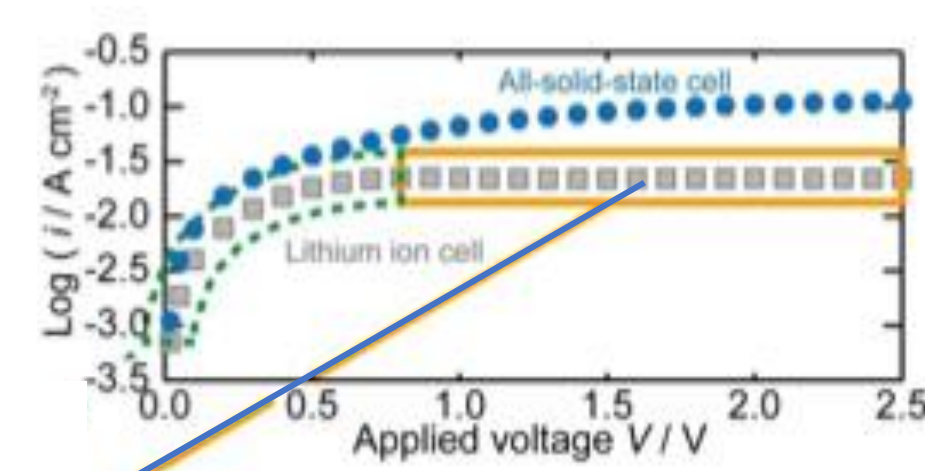
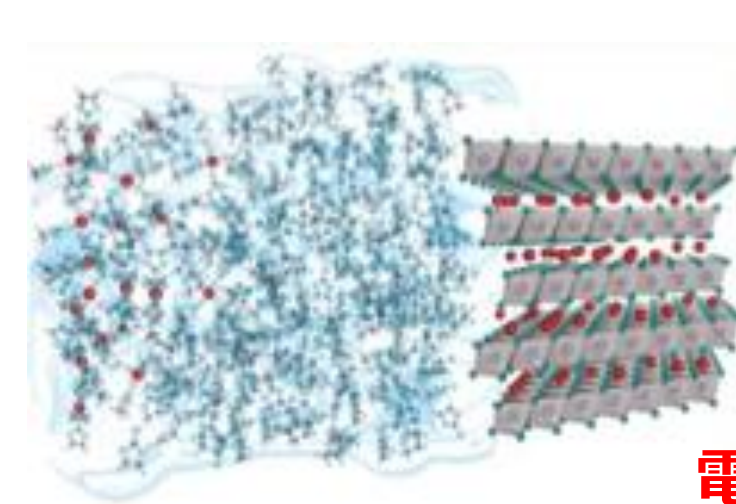


酸化物系Li導電体探索

推薦システムを用いた物質探索の例：Li₂O-ZnO-GeO₂擬三元相図中に既知データベースに登録された組成と推薦システムによる予測組成をプロットし、イオン導電体になり得る組成を考慮して物質探索を進める

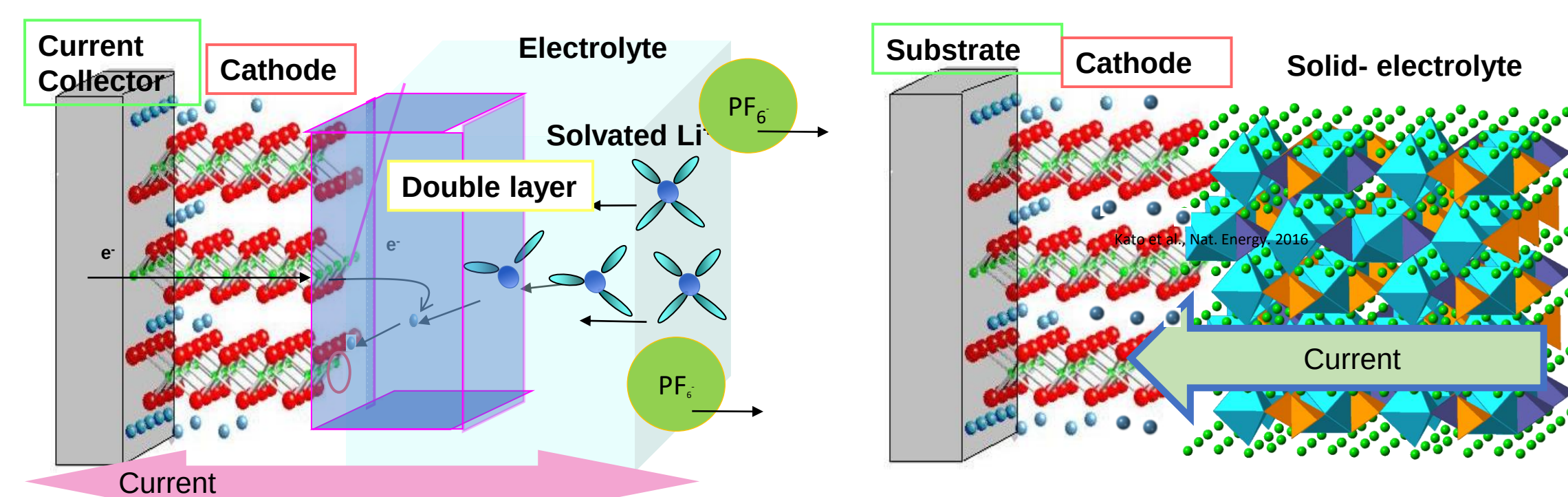
固体電池と液系電池の違い：輸率1の利点

なぜ固体電池が作動するのか



液体電池：電解質中のリチウムイオン拡散が律速
固体電池：拡散律速を示さない高電流がとれる

電極と電解質の界面付近でリチウム拡散が電流の流れに追いついていない状況



固体電解質の輸率は ≈ 1 であり、溶媒との相互作用が無い固体電池においてリチウム拡散の律速課程はバルクの導電率のみで規定される

■結言

全固体電池の実用化にはさまざまな課題があり、本プロジェクトではその共通基盤技術の研究開発に取り組んでいます。全固体電池のキーテクノロジーは固体中を動き回る超イオン伝導体（固体電解質）ですが、その重要な性能指標であるイオン導電率の向上を目指します。イオン導電率が向上することで、電池の出力特性を向上するだけでなく、充電特性の向上も期待できます。次に、高いエネルギー密度を目指します。エネルギー密度の向上は、同一容積・同一重量において蓄えられる電気エネルギー量の増大に直結する重要な性能指標です。たとえば車載用蓄電池の場合、航続距離の増加が見込まれます。また、全固体電池の用途を拡大するため、幅広い温度領域で作動する全固体電池の技術開発を行います。さらに技術課題と研究開発の進捗状況を正確に反映した技術ロードマップの策定を行い、今後の技術開発の指針としていきます。

本プロジェクトは東京工業大学のオープンイノベーション機構（OI機構）と連携しています。将来的には、非競争領域での研究成果を競争領域である蓄電池開発に移行し、OI機構のもとで事業化を推進していくことを目指しています。

電池の将来

