

企画にあたって

松尾元彰* 高木成幸**

ここ数年の第1分科(エネルギー材料)のミニ特集企画では、水素貯蔵材料、熱電変換材料、原子力材料などをテーマとして取り上げてきた。今回の企画では、リチウムイオン二次電池材料にフォーカスをあてることとした。

リチウムイオン二次電池は実用二次電池の中で最もエネルギー密度が高く、従来携帯電話やノートパソコンなどの小型モバイル機器に広く用いられてきた。2010年頃からハイブリッド自動車ですでに使われていたニッケル水素電池がリチウムイオン二次電池へと置き換えられ、また電気自動車の本格的普及に伴い需要が益々増えている。さらに、東日本大震災をきっかけにして関心が高まり、定置用蓄電システムへと用途は拡大している。このような自動車や定置用の大型電池では、小型モバイル機器向けに比べて大幅な高容量化や高性能化が求められるのはもちろんのこと、近年多数報告されている発火事故を防止するために高安全性に対する要求も強い。そのため、その要素技術はすでに成熟していると考えられ、ナトリウムイオン二次電池などのポストリチウムイオン二次電池が注目を集め始めているものの、リチウムイオン二次電池材料の研究開発は近年ますます精力的に進められている。本誌の日本金属学会創立80周年記念特集では、高村仁氏(東北大学)にさまざまな蓄電池に関わる材料の最近の進展についてまとめたが(本記事と併せて改めてお読み頂きたい)、今回のミニ特集ではリチウムイオン二次電池にフォーカスを絞って内容をさらに掘り下げ、また異なった観点での研究成果を紹介する。以下に個々の記事について簡単に紹介させて頂く。

前半の3件は電極材料に関する記事である。小山幸典氏ら(物質・材料研究機構)には、現行のリチウムイオン二次電池の代表的な正極活物質である LiCoO_2 および LiNiO_2 に関して、格子欠陥と異種元素添加に関する第一原理計算を用いた研究成果を紹介して頂いた。電池特性に大きな影響を及ぼす格子欠陥濃度に関して従来定性的な理解にとどまっていたが、第一原理計算を用いることにより定量的な議論が可能となった成果が報告されている。市川貴之氏(広島大学)には、水素化合物を負極活物質に使用した場合の充放電特性について解説して頂いた。水素化合物は従来水素貯蔵/透過材料としての機能が主に注目されてきたが、現行の負極活物質である黒鉛よりも大きな容量を有し、かつサイクル寿命にも優れるため、後述する固体電解質としての用途とともに注目される新

たな蓄電池材料である。和田武氏ら(東北大学)には、金属溶湯脱合金化法を用いたナノオープンポラスSiの作製とそれを負極活物質として応用した場合の充放電特性について紹介して頂いた。Siは重量当たりの理論容量が黒鉛より約10倍も大きいものの、Liの脱挿入に伴う多大な体積変化のために繰り返し充放電を行った際の容量劣化が著しい。それに対して和田氏らが独自開発した本手法を用いて作製されたナノオープンポラスSiは、体積膨張を収容する機能を有しており、容量劣化を抑制できることが報告されている。

後半の2件は、高容量化だけでなく安全性向上にも繋がる全固体化を実現するための固体電解質開発に関する記事を掲載させて頂く。森一広氏(京都大学)には、中性子回折を利用した硫化物系固体電解質の構造研究の一例について紹介して頂く。リバースモンテカルロモデリングとbond valence sum解析を用いることにより、従来用いられてきたリートベルト法や最大エントロピー法では困難であった、非晶質系固体電解質でのイオン拡散経路の可視化に成功した成果について解説して頂いた。吉田浩二氏ら(東北大学)には、水素化合物系固体電解質の開発について紹介して頂いた。非金属元素と水素から構成される多様な水素クラスターを用いて結晶中に三次元的なイオン輸送チャンネルを形成することで、超イオン伝導を示す材料の開発に成功している。さらに、水素化合物系固体電解質を実装した全固体電池において、優れた充放電サイクル特性が得られることが報告されている。

本特集を企画するにあたり、執筆をご快諾いただきました著者の先生方と、ご協力を頂きました第1分科の編集委員の皆様に対し、この場をお借りして心より御礼申し上げます。

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★
松尾元彰
2008年 東北大学大学院環境科学研究科博士後期課程修了
2010年4月 同 助教
2012年3月 同 講師
2016年4月~ 現職
専門分野：材料科学
©水素貯蔵材料や固体電解質の研究開発に従事。
★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★



松尾元彰 高木成幸

* 関西学院大学理工学部; 准教授(〒669-1337 三田市学園 2-1)

** 東北大学金属材料研究所; 准教授(〒980-8577 仙台市青葉区片平 2-1-1)

Recent Advances and Future Perspectives of Material Development for Lithium-Ion Secondary Battery; Motoaki Matsuo* and Shigeyuki Takagi** (*School of Science and Technology, Kwansei Gakuin University, Sanda. **Institute for Materials Research, Tohoku University, Sendai)

Keywords: lithium-ion secondary battery, first-principles calculations, nanoporous-silicon, hydride, Reverse Monte Carlo modelling

2017年5月29日受理[doi:10.2320/materia.56.429]