

研究課題名 超イオン導電体の創出



東京工業大学・物質理工学院・教授 かのりょうじ  
菅野 了次

研究課題番号: 17H06145 研究者番号: 90135426  
研究分野: 固体イオニクス、無機固体化学  
キーワード: 超イオン導電体、電気化学デバイス、中性子、放射光

【研究の背景・目的】

固体中をイオンが高速で拡散するイオン伝導体は電池への応用が期待されているが、物質開拓は遅れている。イオン伝導体さえ存在すれば実現できるエネルギーデバイスも多い。リチウムやナトリウム系では大容量・高出力電池が可能になり(図1)、酸素やプロトン系は燃料電池の高効率作動を可能にする。ヒドリドのような未開拓の材料では、全く新たなサイエンスとともに新規なデバイスの可能性が広がる。

本研究では、未来の電気化学エネルギー変換・貯蔵デバイスの開発の鍵を握る超イオン伝導体において、最高のリチウムおよびヒドリド伝導を示す新物質を創り出す。

1. 開拓する物質系:(i)バルク材料: 広範な組成領域で探索を行い、新物質発見をめざす。(ii)ナノ界面材料: 電気化学ナノ界面で超イオン伝導を示す物質を開拓する。

2. 目標:新物質探索を成功に導くために、(i)元素置換による物質探索、(ii)相関係図に基づく系統合成、(iii)計算化学の手法を用い、効率的に多元系の物質探

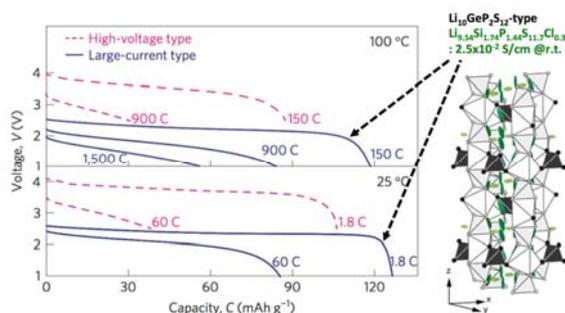


図1 Li超イオン導電体  $\text{Li}_{9.51}\text{Si}_{1.74}\text{P}_{1.44}\text{S}_{11.7}\text{Cl}_{0.3}$  を用いた全固体リチウム電池の充放電性能を索を行なう。

【研究の方法】

バルク超イオン伝導体開発: リチウム系、ヒドリド系で物質探索を行う。通常合成に加え極端条件下の合成(高压力下)で、相関係図作成と物質探索を行う。

ナノ領域超イオン伝導体開発: 真空下での単結晶膜合成(PLD法)によりヘテロ界面を作成し、空間電荷層の制御を行い、イオン拡散に適したヘテロ界面を構築する。

系統的合成手法の構築: 物質合成化学主導の計算

科学手法導入により、系統的合成を実施する。評価、デバイス構築、探索指針確立: 物性評価、デバイス特性の基礎評価を行う。

【期待される成果と意義】

新物質のインパクト: 新物質のインパクトは強烈である。しかし新物質の発見には、物質合成の基本が重要であり、新物質合成の指針が必要である。優れた新物質が発見できれば、社会への影響は大きい。

既存の開発手法から新規手法への探索法の確立: 物質開拓の経験と知識に基づいた手法は、長い歴史があり多くの物質を生み出してきた。一方で、その限界が近づいていることも示されてきた。物質科学の進展のために既存の物質創成の手法を完成させ、物質合成の知識を集積し、新規な計算・情報科学手法との融合を図るための道筋をつけることは、合成化学者の課題である。物質開拓の古典的な知を集積し集大成を目指し、その最先端と限界を示すとともに、新しい物質開拓につなげることは意義がある。

ナノ領域のイオン伝導の確立: 理想界面の作成手法を導入して、系統的にイオン伝導の向上する現象を調べ実際の物質開拓につなげる。ナノ界面での高イオン伝導状態の出現は、新たなイオン伝導体設計手法を生み出すとともに、既存の電池の電気化学界面の設計にも展開できる。

イオン伝導種の展開: 基本的に普遍的な概念に基づく上記の物質開拓に加え、個々のイオン伝導種の物質には特有の物質開発手法がある。本研究では、エネルギー変換デバイスに直結し、かつ拡散が容易な一価のイオン種であるリチウムとヒドリドで物質開発を開始する。特に未知の研究領域であるヒドリド伝導体の可能性が広がれば、新たな科学に発展する。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- *Nat Mater*, 10, 682-686 (2011).
- *Nature Energy*, 1, 16030 (2016).
- *Science*, 351, 1314-1317 (2016).

【研究期間と研究経費】

平成29年度-32年度 129,500千円

【ホームページ等】

<http://www.kanno.chem.titech.ac.jp>