



『リチウムイオン電池の電子の動きを可視化する技術開発と  
電気自動車用大容量電池開発への寄与』

株式会社 日産アーク 今井 英人 氏

＜選定理由＞

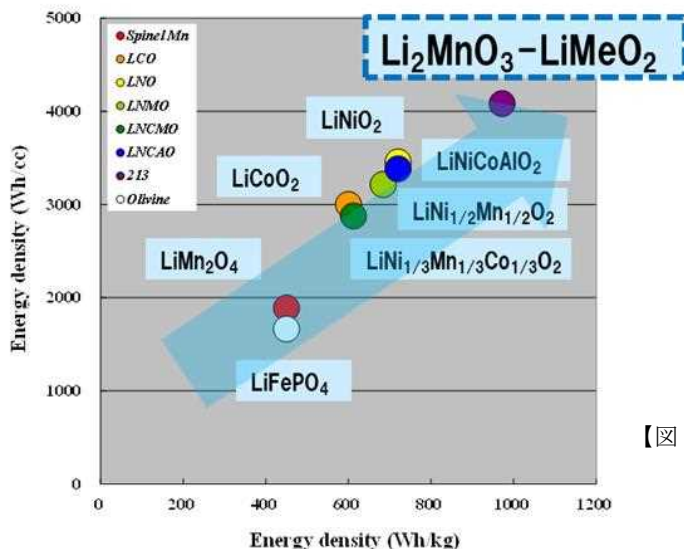
「エネルギー資源」と「環境」問題の解決に向けた研究開発が全世界で進められています。中でも重要な再生可能電力や環境にやさしい電動自動車の大規模導入には、電気エネルギーを貯蔵する大容量で長寿命・安全性の高い蓄電池の開発が不可欠とされています。これまで我が国は、携帯機器用リチウムイオン電池の製品実用化や性能向上で世界の蓄電池産業をリードしてきた実績があり、電気自動車・ハイブリッド自動車にも搭載を始めています【図1参照】。



【図1】充電中の「リーフ」と搭載されているリチウムイオン・バッテリーのパッケージ

電動自動車を本格的に普及させるため、より大容量なりチウムイオン電池や革新電池の開発が、国家プロジェクトをはじめ産官学で進められています。これらの開発で放射光の利用は必須の手段になっており、例えばNEDOによるRISING事業では、大型放射光施設SPring-8に専用ビームラインを設けて様々な開発が進められています。

(株)日産アークの今井英人氏のグループは、日産自動車(株)と共同で大容量電池の開発に取り組んで来ました。リチウムイオン電池は正極材料としてリチウムを含む遷移金属酸化物、負極材料としてカーボンを利用します。充電時にはリチウムイオンがカーボンの層間に蓄積され、放電時には負極材料-電解液-セパレーター-電解液-正極材料と移動し、正極材料に蓄積されます。リチウムイオン電池が蓄積できる電気エネルギーは正極材料に蓄積できるリチウムイオンの数が多いほど大きくなります。現在有力な大容量正極材料は、Li過剰系正極材料と呼ばれる複雑な化合物(例えば $\text{Li}_2\text{MnO}_3\text{-LiMeO}_2$ )です【図2参照】。



【図2】Li過剰系正極材料 $\text{Li}_2\text{MnO}_3\text{-LiMeO}_2$ が大容量電池材料の候補

充電時に負極へ移動するリチウムイオンの電荷を補償するために移動する電子が正極材料のどの元素からどのように放出されたかを正確に知ることで、より安定で高容量な正極材料の開発やリチウムイオン電池の設計・開発が実現されます。

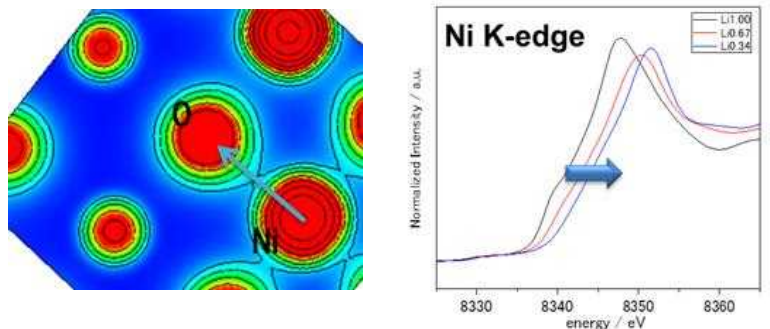
今井英人氏は、リチウムイオン電池が充放電を行う際の電子の動きを知るために、SPring-8の共用ビームラインBL14B2, BL19B2, BL46XUや専用ビームラインBL16XU, BL16B2(サンビーム)を活用して、X線吸収分光法を中心にリチウムイオン電池を充放電過程での正極材料の価数変化や局所構造変化を調べました。さらに、第一原理計算によるスペクトルシミュレーションを併用して解析することで、充放電過程での遷移金属原子、酸素原子周囲の電子の動きを可視化することに成功しました【図3参照】。

その結果、高容量正極材料では充電時には遷移金属の電子だけでなく、酸素に帰属する電子が移動することや放電時には Mn に帰属する電子が寄与していることなどをはじめて明らかにしました【図4参照】。

これらの成果は、現在実用化を目指して開発中の新しい正極材料に活用され、高容量・長寿命・高信頼性の自動車用電池の実現が期待されます。

【図3】

左 電荷を補償するために移動する電子による Ni、酸素まわりの電荷分布の変化  
 右 SPring-8 で得られた XANES スペクトル例



【図4】 充電時にリチウムイオンが正極から脱離する過程

高容量正極材料では充電時には遷移金属の電子だけでなく、酸素に帰属する電子も移動する

