

5 元系全固体フッ化物電池向け 固体電解質材料の開発

～安定性と高エネルギー密度を併せ持った、
固体電解質材料の開発～

名古屋大学 准教授 澤田 康之、教授 齋藤 永宏、講師 KIM Kyusong、助教 CHAYANAPHAT Chokradjaroen、
特任助教 CHAE Sangwoo、研究員 AKCEOGLU Garbis Atam

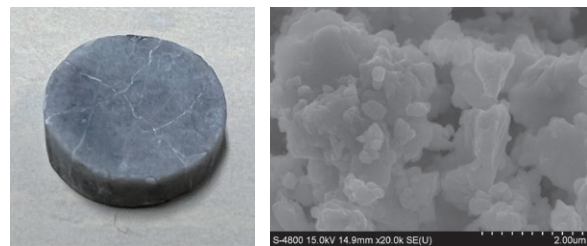
信州大学 教授 手嶋 勝弥、准教授 山田 哲也 (株)名城ナノカーボン 橋本 剛

成果概要

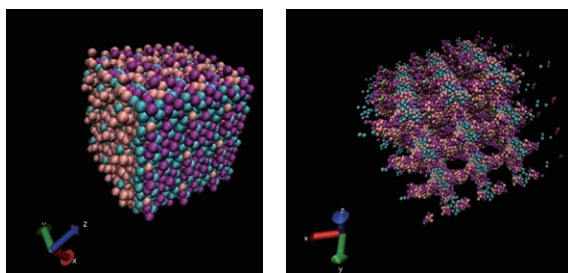
安定性と高エネルギー密度の両立には、主流の2元系・3元系合金では実現できず、安定骨格に寄与する金属原子とイオン伝導に寄与する金属イオンを含めた5元系合金開発が課題であった。そのため、本テーマではフッ素イオンに加えて、Sn,Pb等を含めた5元系合金を主にスパークプラズマ焼結法を用いて合成した。その結果、新しい合金相ができたのをXRDで確認した。またイオン伝導度を測定したところ、既存の全固体電池向けの固体電解質材料と同等のイオン伝導度を示した。また、構造の安定性とイオニクスの両立が可能なことを計算機シミュレーションから示唆された。

特徴

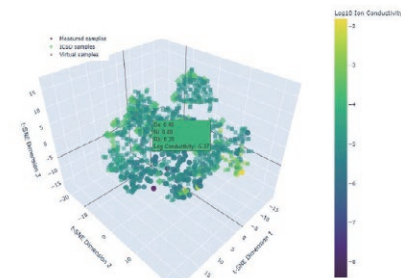
- 既存の硫化物系・酸化物系固体電解質材料と比較して安定的な骨格を有する、高耐久性に寄与する構造設計がなされた。
- 安定性維持しつつ、現在主流のイオン伝導度を示しており、高いエネルギー密度を併せ持つことが示された。
- 計算機シミュレーションを用いたイオニクスの解明ができ、これは今後の類似材料の開発ならびに性能予測の手段として活用できる。



固体電解質として開発した5元系フッ化物合金(左)とそのSEM画像(右)



合成した合金の実験・分析結果を基にして分子モデルを構築し、分子動力学シミュレーションを実施した結果、合金の安定相と不安定相となる組成について実際に合成したサンプルのXRD測定結果との一致を確認した。



多元素置換結晶育成し測定したXRD特徴量(回折角度、強度比等)及び文献データに基づく組成・構造情報(原子番号、イオン半径、価数等)と電気伝導度との相関マップ。

これによると、低い平均電気陰性度、ハイレントロピー領域で、高伝導になる傾向が見られたことから、そのインフォマティクスの結果に基づき合金合成してイオン導電性を評価。

名古屋大学と信州大学との異なるアプローチによる材料探索

仕様

- 電池セル外寸 W: 10×H: 10×D: 5mm
- 電池セル重量 1.0g
- その他 コイン型電池試作用の固体電解質材料として開発したもの。

開発技術

計算機シミュレーションを実施するにあたり、新規の合金材料の構造設計に基づく原子間の相互作用を再現するためのパラメータ開発が必要だったため、本テーマで開発した合金材料に対する新規パラメータ開発・活用を行った。

今後の展開

今後は、電解質材料だけでなく電極材料の開発も実施し、最終的にはその組み合わせでさらに高エネルギー密度・高耐久性を併せ持つ全固体電池の実現ができると期待される。また、それらの組み合わせについては計算機シミュレーションによる予測モデルを活用できる。

- お問い合わせ先：名古屋大学 未来社会創造機構マテリアルイノベーション研究所 澤田 康之
sawada.yasuyuki.n4@f.mail.nagoya-u.ac.jp
電話番号：052-789-3260 FAX：052-789-3259
- 特許の有無：無