

第17回青葉工学振興会賞



エネルギー機能材料のアニオン欠陥エンジニアリング

東北大学
多元物質科学研究所
准教授 中村 崇司

持続可能な社会の実現に向けて、大規模かつ高効率な再生可能エネルギーの利用が必要とされている。これに向けて燃料電池や触媒、蓄電池などのエネルギー変換・貯蔵技術の高度化が必要不可欠である。上記技術の根幹を支えるエネルギー機能材料では、材料中の「欠陥」が機能の源となっている。例えば、存在するべきイオンが抜けた「空孔」や空隙位置に存在する「格子間イオン」は、イオン伝導キャリアや反応活性点として機能することが知られている。また材料中に導入した異種元素も置換型の「欠陥」として扱うことができる。著者は「欠陥」を自由自在に制御することで従来に無い機能性材料を創出することを目標として、材料中で欠陥がどのように生成し、どのような機能を持つのかを明らかにするとともに、欠陥を自在に制御する技術を開発し、欠陥制御型材料を創出することに取り組んでいる(図1)。本稿では、特に重要な3つの成果について紹介する。

① リチウムイオン電池正極の格子酸素安定性評価

リチウムイオン電池は様々なデバイスのエネルギー源として幅広く利用されているが、熱暴走により発火や爆発が起こることが知られている。熱暴走は正極材料(遷移金属酸化物)から脱離した酸素と可燃性の電解液が反応することから、現在精力的に開発が進められている各種次世代型蓄電池にも同様のリスクが懸念される。熱暴走を抑制するためには、正極材料からの酸素脱離(=酸素空孔生成)を理解し、酸素脱離抑制の指針を確立することが有効である。著者は固体イオニクスの実験手法を蓄電材料に適用することで、リチウムイオン電池正極の酸素脱離挙動を評価し、酸素脱離エネルギーを実験的に算出することに成功した。実験に基づく格子酸素安定性評価プロトコルを提唱し、世界で初めて、その有効性を実証した[1,2]。

② リチウムイオン電池正極の酸素欠陥制御

欠陥の能動制御による機能開拓の例として、任意量の酸素空孔を導入したリチウムイオン電池正極を合成した。還元処理による機能増強の検討はこれまでも報告があったが、定量的に酸素空孔量を制御したうえで、酸素空孔が電池特性に与える影響を詳細に検証した例は著者らの取り組みが初めてである。合成試料の分析および電池特性評価の結果、酸素空孔を導入することで結晶構造が安定化し、充放電時の劣化を大きく抑制できることを明らかにした[3]。これは、著者が推進する「欠陥能動制御による機能開拓」が有効な材料開発戦略であることを実証した重要な研究成果である。

③ 欠陥制御用電気化学リアクターの開発

これまで、カチオン(陽イオン)の組成制御により、無機機能性材料が開発されてきた。しかし近年の絨毯爆撃的な探索により、材料開発戦略としての有効性が頭打ちしつつある。カチオン制御に代わる新たな材料開発戦略として、アニオン(陰イオン)組成制御が期待されている。著者は電気化学を応用したアニオン欠陥制御技術の開発に取り組んでいる。アニオン伝導性電解質上に対象材料を配置し、アニオンを電圧で駆動することにより対象材料に注入する。著者が開発した電気化学リアクターは、(1)電圧印加という簡便な操作によりアニオンドープの駆動力を制御できる、(2)電解質を交換することで多様なアニオン種を制御できる、(3)供給するアニオン量をリアクターに流した電流量で精密に制御できる、といった、優位性を有している。ペロブスカイト型酸化物へのフッ素ドープにより、電気化学的アニオン欠陥制御という新しい材料開発コンセプトを実証した[4]。

今後は欠陥制御技術をさらに高度化するとともに、「欠陥機能を最大限に活用する」という新戦略に基づいたエネルギー機能材料の創製に取り組む。これにより、エネルギー変換・貯蔵技術の発展を通して持続可能な社会の実現に貢献することを目指す。

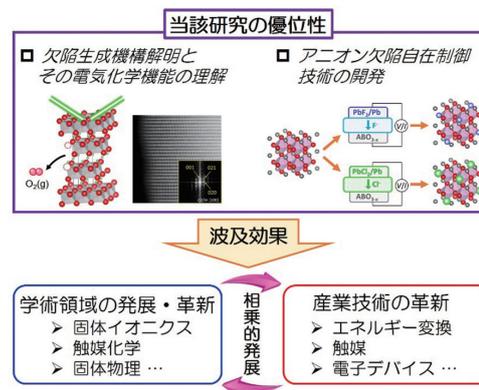


図1 本研究の優位性と波及効果

- [1] X. Hou, *ACS Energy Lett.*, 2022, 7, 1687.
 [2] X. Hou, *Adv. Energy Mater.*, 2021, 11, 2101005.
 [3] T. Nakamura, *J. Mater. Chem. A*, 2021, 9, 3657.
 [4] T. Katsumata, *Adv. Funct. Mater.*, 2023, in press.