

## 先端エネルギー変換研究部門における蓄電池材料研究の現状

研究推進機構 総合研究院 先端エネルギー変換研究部門

### ▶ 研究概要

- 大型車両用リチウムイオン電池と資源制約フリーのマグネシウム蓄電池の開発に取り組んだ。
- 全散乱実験と理論計算、数学的手法により、電極材料の原子配列を解明した。
- 原子配列と電極特性の関係を明らかにし、より優れた電極材料の設計指針を提示した。

### ▶ 研究開発成果

#### 大型リチウムイオン電池用負極材料の開発

科研費・学術変革領域研究(A)「超秩序構造科学」

新規負極材料の候補であるWadsley-Roth相の $\text{TiNb}_2\text{O}_7$ について、全散乱データを用いた逆モンテカルロモデリングにより原子配列を可視化し、構造データベースを構築した。

また、数学的手法（トポロジー解析）により原子配列を数値化し、リング構造の乱れが負極材料の設計指針となることを解明した。

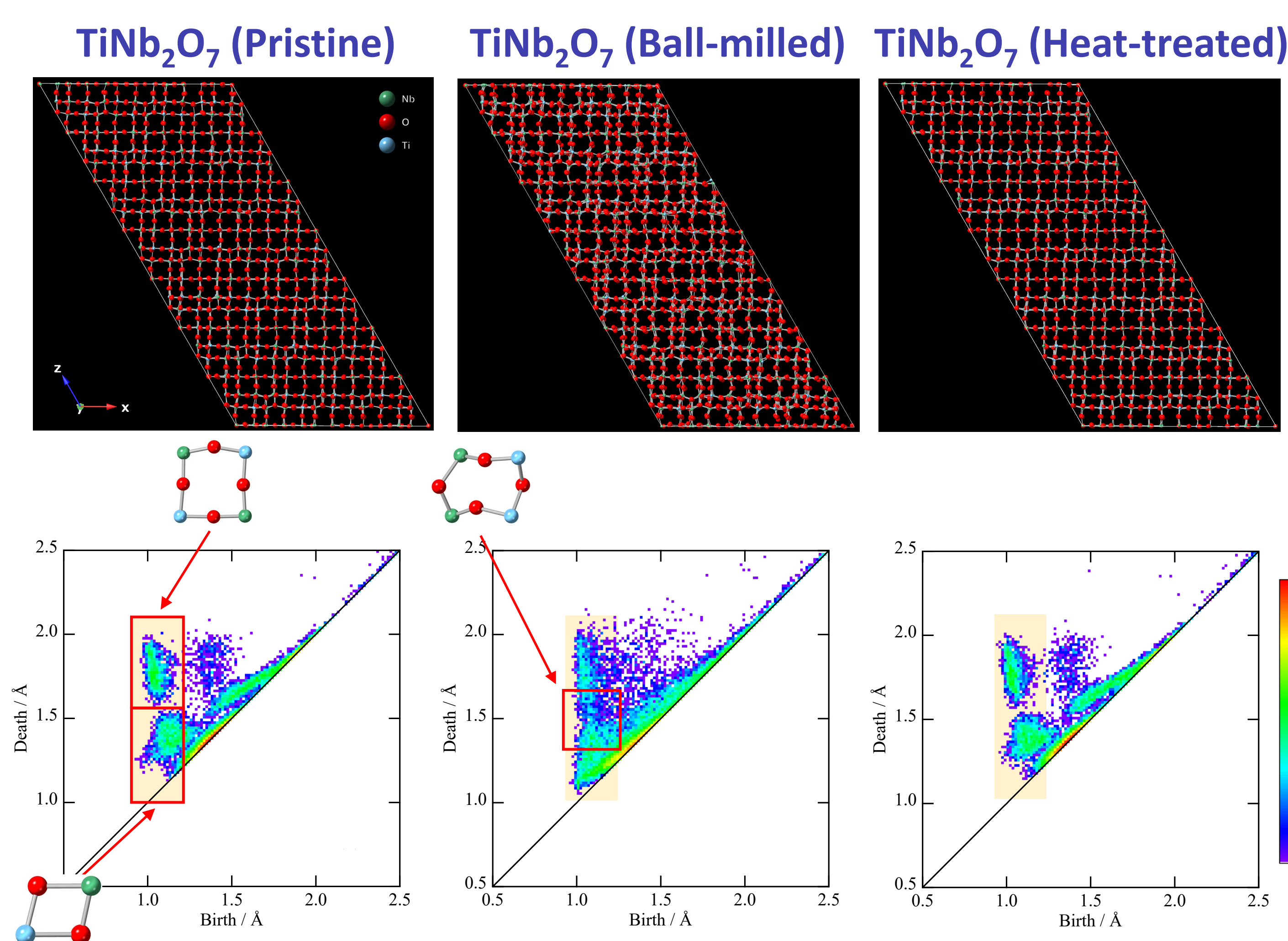


Fig. 逆モンテカルロモデリングにより構築した原子配列と、その乱れの数値化（パーシステント図）

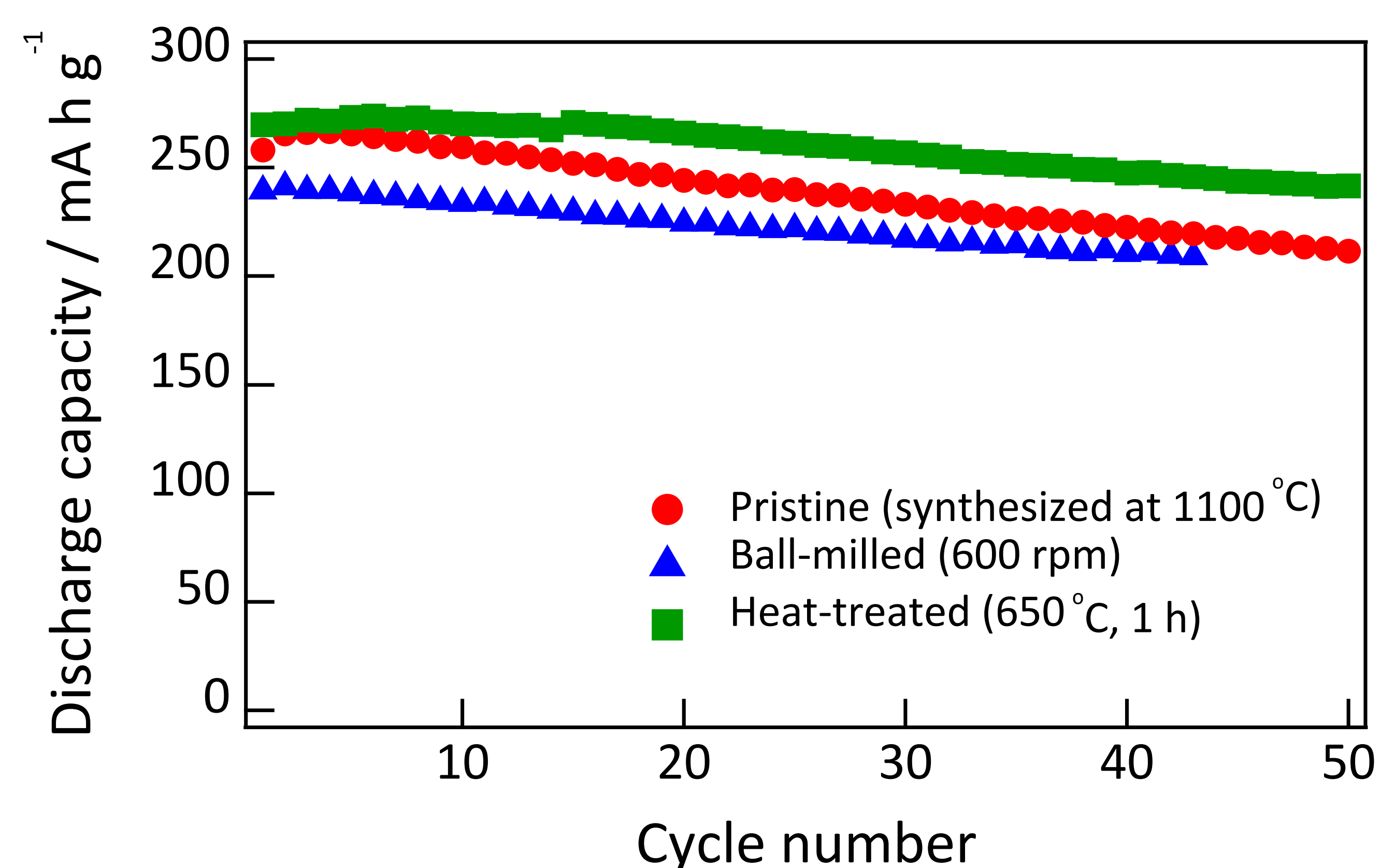


Fig. 原子配列の乱れが異なる $\text{TiNb}_2\text{O}_7$ の負極特性

N. Kitamura et al., *NPG Asia Materials*, in press.

#### マグネシウム蓄電池用正極ナノ粒子の開発

JST・革新的GX技術創出事業、科研費・基盤研究(B)

スピネル型構造の正極ナノ粒子の1つである $(\text{Mg}, \text{Zn})\text{Co}_2\text{O}_4$ の原子配列を、逆モンテカルロモデリングと計算科学的手法による構造緩和により可視化した。

これにより、ナノ粒子における各元素の役割を検討した。

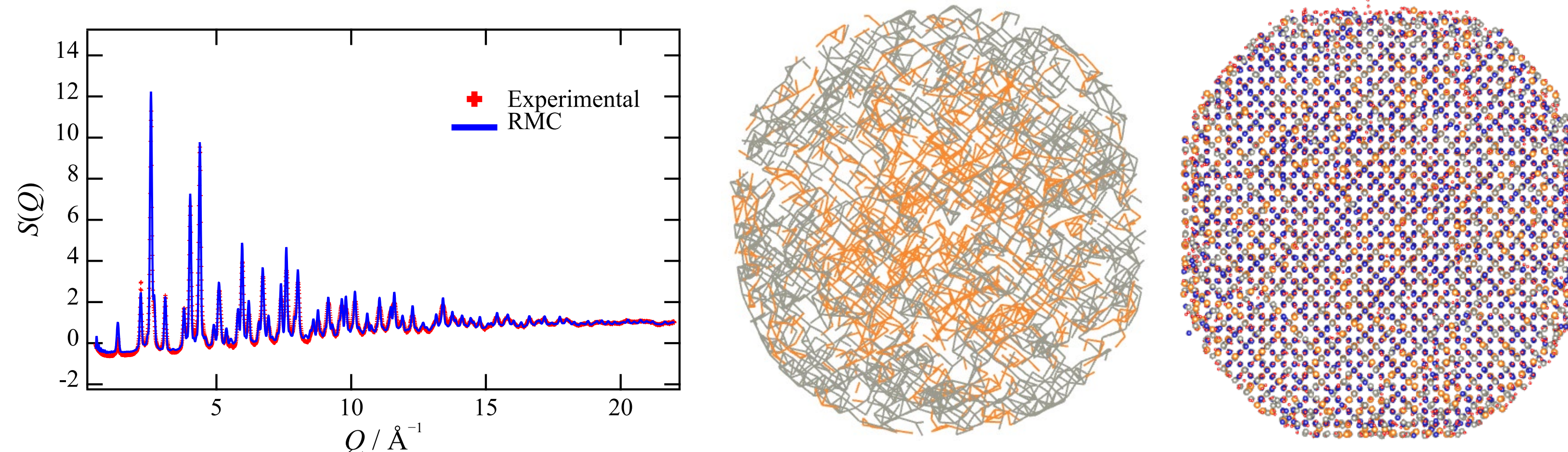


Fig. X線構造因子のフィッティングパターンと構築された $(\text{Mg}, \text{Zn})\text{Co}_2\text{O}_4$ ナノ粒子の原子配列

### ▶ 今後の展開

上記の手法を他の結晶、ナノ粒子、合金、非晶質・液体などに適用し、蓄電池材料を含めた新規機能性材料の開発に展開する。

【連絡先】 研究部門長（創域理工学部先端化学科）  
 郡司 天博  
 gunji@rs.tus.ac.jp

- ・ 非晶質シリカ  
 M. Murakami, S. Kohara, N. Kitamura, et al., *Phys. Rev. B*, **99**, 045153 (2019).  
 S. Sato, M. Miyakawa, T. Taniguchi, Y. Onodera, K. Ohara, K. Ikeda, N. Kitamura, et al., *J. Ceram. Soc. Jpn.*, **132**, 427 (2024).
- ・ インバー合金  
 N. Ishimatsu, S. Iwasaki, M. Kousa, S. Kato, N. Nakajima, N. Kitamura, et al., *Phys. Rev. B*, **103**, L220102 (2021).
- ・ 燃料電池・圧電材料  
 N. Kitamura et al., *Chem. Lett.*, **48**, 1398 (2019).