

中性子散乱による固体電解質中の リチウムイオンの伝導経路と動きの観察

Observation of Li-ion conduction pathways and diffusion in solid electrolytes studied by neutron scattering

森 一広

京都大学 原子炉実験所

リチウムイオン電池(LIB)は、現代社会の基盤を支える重要なキーテクノロジーの1つであり、その用途は、携帯電話やパソコンのような小型機器から電気自動車や家庭用蓄電システムなどの大型機器へと広がっている。このような背景から、LIBの大容量化、高出力化および安全性の向上がより一層求められている。LIBは、3Vを超える起電力を発生するため、高いエネルギー密度を得ることが可能である。しかしながら、LIBの電解質は主に可燃性の有機電解液であることから、発火や漏洩の危険性を常に孕んでいる。このような問題を解決する方法として、電解質の無機物化(不燃性固体電解質の利用)による全固体LIBが検討されている。本講演では、全固体LIB固体電解質材料の有力候補である $\text{Li}_2\text{S-P}_2\text{S}_5$ 系ガラスおよび $\text{Li}_7\text{P}_3\text{S}_{11}$ ガラスセラミックスに関する中性子散乱を利用した研究例とその魅力について紹介する[1,2]。

パルス中性子回折実験は、大強度陽子加速器施設/物質・生命科学実験施設(J-PARC/MLF)に設置されている高強度全散乱装置NOVA(BL21)を用いて行った[3]。また、Liイオンの動き(拡散)を直接観測するため、ダイナミクス解析装置DNA(BL02)を利用し、温度を変えながら中性子準弾性散乱実験を行った[4]。

中性子回折データを用いて逆モンテカルロ(RMC)モデリングおよびbond valence sum(BVS)解析を行い、 $\text{Li}_2\text{S-P}_2\text{S}_5$ 系ガラスおよび $\text{Li}_7\text{P}_3\text{S}_{11}$ ガラスセラミックスの構造を明らかにし、リチウムイオン伝導経路を可視化することができた。さらに、 $\text{Li}_7\text{P}_3\text{S}_{11}$ ガラスセラミックスの中性子準弾性散乱実験により、リチウムイオンの拡散挙動を示す準弾性散乱成分の観察に成功し、Jump diffusionモデルにより、リチウムイオンが平均4.3 Åで伝導経路内をジャンプしながら移動していることを明らかにした。

[1] K. Mori *et al.*, Chem. Phys. Lett., 584 (2013) 113–118.

[2] K. Mori *et al.*, Phys. Rev. Applied, 4 (2015) 054008 (pp. 1–6).

[3] 大友季哉, 鈴谷賢太郎, 日本結晶学会誌, 50 (2008) 29–34.

[4] K. Shibata *et al.*, JPS Conf. Proc., 8 (2015) 036022 (pp. 1–7).