

未来社会創造事業 探索加速型
「共通基盤」領域
年次報告書(探索研究期間)

令和3年度 研究開発年次報告書

令和3年度採択研究開発代表者

[研究開発代表者名：雨澤 浩史]

[東北大学多元物質科学研究所・教授]

[研究開発課題名：3D マルチスケール/モーダルオペランド
化学分析プラットフォームの確立]

実施期間：令和3年10月1日～令和4年3月31日

§1. 研究開発実施体制

(1)「高空間/時間分解 X 線 CT-XAFS 計測技術の開発」グループ(高輝度光科学研究センター)

①研究開発代表者:関澤 央輝 (高輝度光科学研究センター放射光利用研究基盤センター分光推進室、主幹研究員)

②研究項目

- ・高空間/時間分解 CT および CT-XAFS 計測技術の開発
- ・蓄電池材料評価のための高速オペランド CT-XAFS 計測システムの構築

(2)「高空間/時間分解オペランド X 線 CT-XAFS 計測」グループ(東北大学)

①主たる共同研究者:雨澤 浩史 (東北大学多元物質科学研究所、教授)

②研究項目

- ・蓄電池作動条件下での計測が可能な結像型・投影型 X 線 CT-XAFS 計測セルの開発
- ・蓄電池合剤正極の結像型・投影型オペランド CT-XAFS 計測の実施
- ・蓄電池合剤正極の活物質粒子性状と電気化学特性の相関の検討

(3)「高空間/時間分解オペランド X 線 CT 計測」グループ(京都大学)

①主たる共同研究者:内本 喜晴 (京都大学大学院人間・環境学研究科、教授)

②研究項目

- ・蓄電池作動条件下での計測が可能な結像型・投影型 X 線 CT 計測セルの開発
- ・蓄電池合剤電極のマルチモーダル計測に向けた実験条件, 計測モードの最適化
- ・蓄電池合剤負極のモルフォロジーと電気化学特性の相関の検討

(4)「実構造に基づく輸送-反応連成数値解析」グループ(京都大学)

①主たる共同研究者:岩井 裕 (京都大学大学院工学研究科、教授)

②研究項目

- ・電極の均質化モデルを採用した一次元輸送-反応連成数値解析
- ・電極の実構造に基づく三次元輸送-反応連成数値解析

§2. 研究開発成果の概要

本研究開発では、高空間/時間分解、マルチスケール/モーダル、三次元で、デバイスや材料内部の微細構造や化学状態分布をオペランド分析できる、X 線 CT および X 線 CT-XAFS 計測を基盤とした化学分析プラットフォームを確立することを目的としている。この目的に対し、今年度は主に、高空間/時間分解 CT および CT-XAFS 計測技術の開発、蓄電池を計測対象にしたオペランド CT および CT-XAFS 計測用セル・システムの開発ならびにこれらを利用した蓄電池合剤電極の分析、さらには、計測結果を考慮・再現する輸送-反応連成数値解析手法

の開発、を実施した。計測技術の開発では、高速回転ステージ導入と QXAFS 法を組み合わせることで、時間分解能 1~3 分、空間分解能 1.6 μm (いずれも目標値を達成)の投影型 CT-XAFS 計測を可能とした。オペランドセル・システムの開発に関しては、蓄電池作動条件下(温度, 雰囲気, 通電, 加圧等)での計測を可能とするセル・システムを構築し、合わせて、計測条件、手法の最適化も実施した。また、これらのオペランド計測セル・システムを用いることで、全固体電池の合剤正極・負極における微細構造、反応分布を電池作動下で、三次元かつ高空間分解能で可視化することに成功した。例えば、結像型 CT-XAFS 計測では、空間分解能 140 nm、時間分解能 2.5 時間と、今年度の目標値をクリアするスペックでの測定がなされた。さらに、これらの計測を通し、電池の性能向上・低下を引き起こしている要因を明らかにすることにも成功し、開発された手法の蓄電池開発に対する有用性を実証した。連成数値解析手法の開発では、主に、均一な電極構造を仮定した一次元モデルを用いた非定常計算を実施した。また、電極の実構造に基づく三次元解析も開始した。

【代表的な原著論文情報】

1. 雨澤浩史,、木村勇太,「放射光 X 線を用いた全固体電池における反応分布の三次元オペランド分析」、電気化学、90(1)、32-38 (2022).