

# 欠陥エンジニアリングによるエネルギー機能材料の開発

## Development of energy materials based on defect engineering

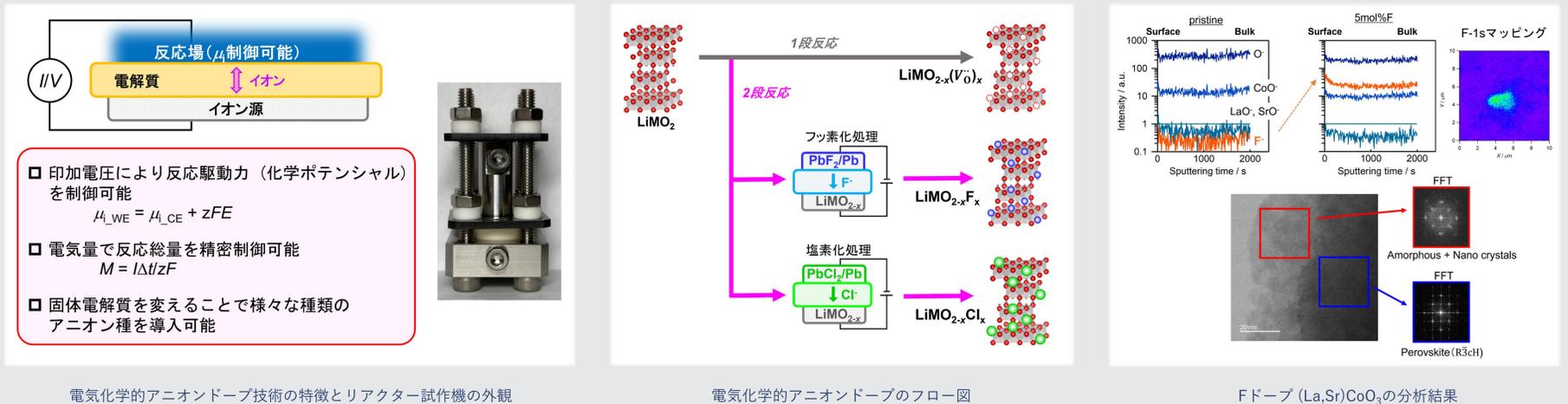
エネルギー機能設計工学：中村崇司

Division of Materials Research,  
Energy Function Design Engineering group

【グループの研究目標】 燃料電池や蓄電池などのエネルギー変換・貯蔵デバイスに利用される材料では、“欠陥”が機能の源となっています。当グループでは、材料中の欠陥がどのように形成され、どのような機能を持つのかを明らかにすることで、欠陥を有効に活用するための材料設計指針の確立に取り組んでいます。また、上記のようなメカニズムの解明にとどまらず、材料中の欠陥を自由自在に制御する技術を開発し、欠陥制御型の革新的エネルギー材料創出にも挑戦しています。

### 電気化学的アニオンドープ技術の開発

従来のカチオン（陽イオン）組成制御に代わる新たな材料開発戦略の一つとしてアニオン（陰イオン）機能の活用が注目されています。しかしアニオン組成制御は技術的に難しく、合成できる材料系には限りがあります。本研究では電気化学の力を材料合成に応用することで、異種アニオンを自在にドーピングする技術の確立を目的とします。本技術の原理実証として電気化学リアクターの試作機を開発し、ペロブスカイト酸化物 (La,Sr)CoO<sub>3</sub> の酸素サイトに任意量のFを導入できることを実証しました。本技術はアニオン機能を活用した新たなエネルギー材料の開発を大きく進展させる可能性を秘めた技術であり、現在、さらなる高度化に取り組んでいます。



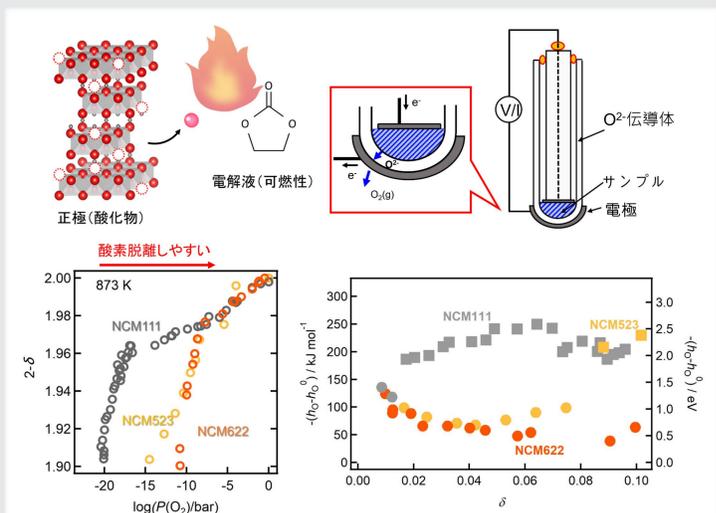
電気化学的アニオンドープ技術の特徴とリアクター試作機の外観

電気化学的アニオンドープのフロー図

Fドーピング (La,Sr)CoO<sub>3</sub> の分析結果

### 蓄電池正極材料の高信頼性化

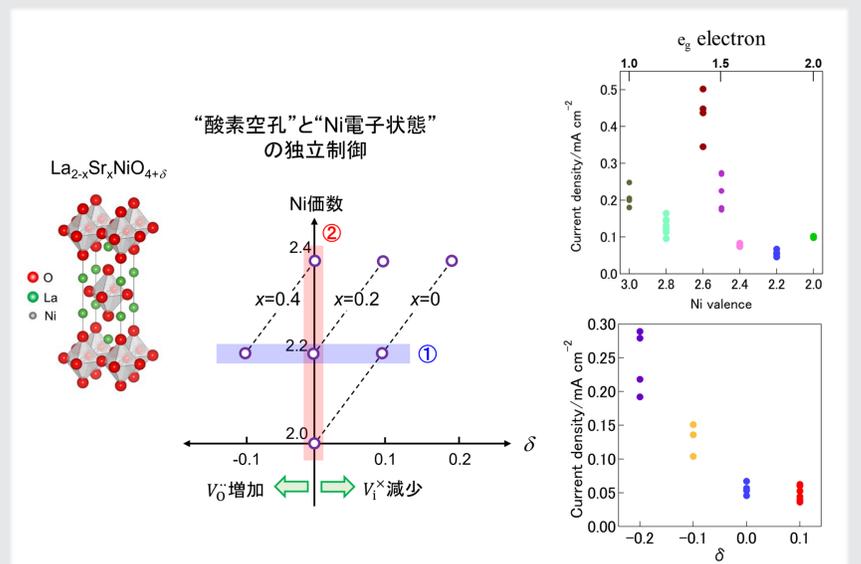
高エネルギー密度の蓄電池はGXの実現に向けて必要不可欠な技術ですが、発火や爆発など、安全上のリスクが無視できません。当グループでは、蓄電池の高信頼性化に向けて、熱暴走の原因となる正極材料からの酸素脱離現象の解明に取り組んでいます。例えばリチウムイオン電池正極材料では、高価な遷移金属が格子酸素を不安定化することを明らかにし、酸素脱離に必要なエネルギーを実験結果から算出にも成功しました。本研究で得られる知見は、正極材料そのものの格子酸素安定性を示す重要な指標になります。本評価技術を軸として、高エネルギー密度と信頼性を両立した次世代電池材料の開発に挑戦しています。



リチウムイオン電池正極 Li(Ni,Co,Mn)O<sub>2</sub> の酸素脱離挙動および酸素脱離エネルギー

### 水電解触媒の性能決定因子の同定

水素社会の実現に向けて、水素製造技術の発展が期待されています。アルカリ水電解に利用されるペロブスカイト酸化物触媒では、“酸素空孔”が反応活性点として機能することや、電荷移動反応を促進するような“遷移金属の電子構造”が重要な要素であることが提唱されています。しかし両因子は互いに影響しあっており、その影響を独立に評価することは困難でした。当グループでは、欠陥制御技術を活用することで各因子を独立に制御し、性能決定因子の真の影響を明らかにします。本研究を通して、高活性触媒の創出につながる学理構築を目指しています。



欠陥化学に基づく触媒性能決定因子の独立制御