

二次電池材料の微細構造解析

Microstructure Analysis of Electrodes for Secondary Batteries

京都大学 成長戦略本部 堀 博伸

研究成果概要

蓄電池(二次電池)の構造は、リチウムイオン電池を例にすると一般に正極/電解質/負極からなる。正極・負極の各電極は充放電反応の元となる材料(活物質)と、電子伝導性を担保する材料(導電助剤)やそれらを結着させるバインダーを混合したもの(合材)が銅やアルミなどの金属シート(集電体)上に塗布された構造となっており、合材電極とも呼ばれている。電池内では正極と負極の各合材電極の塗布層(合材層)が電解質を挟んで対向した構造となっている。電解質には液体と固体があるが、液体の場合は合材層に電解質が浸透することでイオン伝導性を担保している。充放電反応は合材層内の活物質とイオンと電子による反応であり、イオンは電池内部の電解質を通して、電子は電池外部の導線とつながっている電池内の集電体を介して、それぞれ正極・負極内の各活物質に供給・放出される。

二次電池の高性能化には活物質の特性向上に加え、活物質とイオンと電子との反応がスムーズに行えるような、合材層内の各材料の混合状態の最適化も必要となる。最適化には様々な条件により得られる合材層内の混合状態、とりわけ3次元での情報が有用となってくる。合材層内の混合状態を調べる方法として、例えば合材層の断面の顕微鏡観察があるが、得られるデータは2次元観察像にとどまる。3次元データを得る方法としては3D-SEM や3D-TEM、X線 CT 等があるものの、通常の2次元観察データと比べるとデータの入手が難しい点が挙げられる。

一方、SEM 観察などで得られる2次元画像をもとに3次元構造を比較的容易に推定する手法として、画像生成 AI 技術を用い2次元画像から3次元構造を生成する手法が知られており合材電極の研究に応用されている。本研究ではこの画像生成 AI を用いた手法についての有効性の検討を行った。3次元構造の生成には画像生成 AI の GAN(敵対的生成ネットワーク)のひとつである SliceGANを利用した。この SliceGANを用い2次元画像データによりモデルを学習したうえで、この学習モデルから3次元構造を生成すると、得られた3次元構造は実際の3次元構造と類似した構造になっており、この手法が比較的簡単に3次元構造を推定する手法の一つとして有効であることが確認できた。今後はこの手法で得られる3次元モデルを合材電極の特性解析等に利用する予定である。

参考文献

- 1) Kench, S., and Cooper, S.J., *Nat. Mach. Intell.*, **3**, 299 (2021).
- 2) Hsu, T. et al., *J. Power Sources*, **386**, 1 (2018).
- 3) 蒲生浩忠, 佐野光, 清林哲, 城間純, 前田泰, 第 64 回電池討論会, 3B10 (2023).