

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)は一般に正極/電解質/負極から構成されており, このうち正負の電極は活物質や導電助剤, 結着剤の混合物(合材)となっている. 二次電池の高性能化には合材を構成する各材料の特性向上に加え, 合材内の各材料の混合状態の最適化も重要であり, この最適化には様々な混合条件により得られた合材層内の混合状態と電池特性の関係性を把握することが必要となってくる. 合材層内の混合状態を得る手法としては顕微鏡などの 2 次元観察のほか, 近年では3D-SEM や3D-TEM, X 線 CT 等の3次元データを得る方法も用いられてきている. ただし3次元データの取得は, 通常の2次元観察データと比べると一般的にデータの入手が難しい点が挙げられる.

一方で近年急速に発達している画像生成 AI 技術を用い SEM 観察などで得られる2次元断面画像をもとに3次元構造を比較的容易に推定・生成する手法が開発されており, 合材電極の構造解析に応用されている. 合材電極内の3次元微細構造と得られる電池特性との関係性を見るためには多数の条件での3次元構造データを得る必要があり, 3次元データすべてを実測で入手することは困難を伴うが, 画像生成 AI を用いた3次元構造データ生成技術で実測データを補完することにより構造と電池特性のより詳細な関係性を明らかにできる可能性がある. そこで本研究では昨年度に引き続き画像生成 AI を用いた手法を用いた合材電極の3次元構造解析について検討を行った.

本年度は昨年度までの GAN (敵対的生成ネットワーク) をもとにした生成モデル (SliceGAN) のほか, 近年の画像生成の主流となっている拡散モデルをもとにした生成モデルについての検討を行った. その中で MicroLad という潜在拡散モデル(LDM)とスコア蒸留サンプリング(SDS)を用いた手法に注目した. この MicroLad は SliceGAN と同様に2次元画像データで学習したモデルから3次元構造を生成することが可能となっている. 本研究では MicroLad をもとに, 条件付きモデルへの拡張を行い, 条件として FFT パワースペクトルを用いることによりパワースペクトルに対応した断面形状を持った3次元構造の生成が可能であることが確認できた. このことは様々な測定データを条件とした3次元構造を生成できることを示しており, この技術が電池特性の把握と向上のための強力なツールとなることを示している.

【参考文献】

- 1) Kench, S., and Cooper, S.J., *Nat. Mach. Intell.*, **3**, 299 (2021).
- 2) Lee, K.-H., and Ahmed, F., *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, **449**, 118527 (2026).
- 3) Robertson, A.E., et al., *Integr. Mater. Manufact. Innov.*, **13** 120 (2024).
- 4) Hsu, T., et al., *J. Power Sources*, **386**, 1 (2018).