

次世代リチウムイオン電池への 閃亜鉛鉱型 SiC の応用可能性

SATテクノロジー・ショーケース2026

■ はじめに

電気自動車の普及や再生可能エネルギーの有効活用のために、より高容量な二次電池の開発が期待されている。現在、リチウムイオン電池の負極として、黒鉛電極が広く使われているが、さらなる高容量化のためには新たな負極材料が必要不可欠である。そこで有望なのは、シリコン系負極材料である。

シリコンの重量当たりのエネルギー密度は 4200 mAhg^{-1} であり、黒鉛電極の 372 mAhg^{-1} を大きく上回る。一方で、シリコンはリチウムの脱挿入に伴う体積の膨張率が300 %超と大きく、充放電サイクルにより性能が大幅に低下する課題がある¹⁾。そこで、次世代の負極材料として、シリコンカーバイド(SiC)に注目する。シリコンカーバイドはシリコン系負極の一種であり、理論容量は 1250 mAh^{-1} と、高い容量を持つ。閃亜鉛鉱型と呼ばれる構造を持ち、リチウム化による体積膨張率が小さい。実際、同構造を持つInSbでは5.6 %の体積膨張率と報告されている²⁾。一方、シリコンカーバイドは半導体に代表される材料であり、大きな電気抵抗が電極材料への適用では課題となる。さらに、シリコンカーバイドは強い共有結合性を有するため、リチウムが侵入可能な空隙が限られ、リチウムの拡散係数が低いことも課題である。

本研究では、閃亜鉛鉱型のシリコンカーバイドの負極材料としての適用可能性を、実験および計算科学的観点から検討する。

■ 活動内容

1. 第一原理計算

第一原理計算には密度汎関数(DFT)理論に基づくVASPコードを用いた。SiCの単位胞(図.1a)を $2 \times 2 \times 2$ の格子(図.1b)に拡張したスーパーセルを用いて計算を行った。その格子間位置にリチウムを1つ入れたものをSiC/Liと表現する(図.1c)。このSiCとLi、SiC/Liに対し、第一原理計算を用いて、構造最適化、すなわちエネルギー的に最安定な結晶構造の探索、を行った。また、シリコンカーバイドの電気抵抗と拡散性改善のためホウ素(B)ドーピングを行ったシリコンカーバイドも計算対象とした。

2. 結果と考察、今後の展望

SiCとLi、SiC/Liの生成エネルギーを計算し、リチウム化に必要なエネルギーが求めた。純粋なシリコンカーバイド

へのリチウム挿入反応に要するエネルギーは1.74 eVとなり、自発的には進行しないことが分かった。一方、シリコン1つをホウ素に置換した構造($\text{BLiSi}_{31}\text{C}_{32}$)では、リチウム化に必要なエネルギーは-0.285 eVとなった。今後は実験的手法により、閃亜鉛鉱型シリコンカーバイドへのリチウム挿入反応や、電極特性を評価する計画である。

■ 参考文献

- 1) M. F. Oszajca et al., Chem. Mater. 26, 5422-5432 (2014).
- 2) R. Nandan et al., J. Mater. Chem. A 10, 5230-5243 (2022).

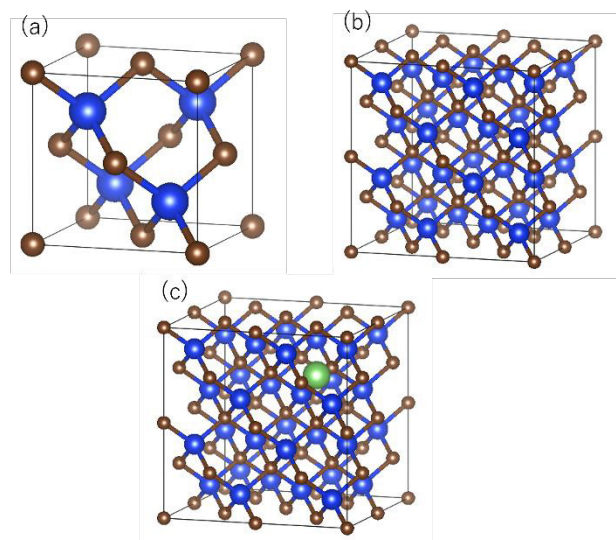


図1 シリコンカーバイドの結晶構造。青がシリコン、茶が炭素、緑がリチウムを表している。(a) SiCの単位胞。(b) SiCの $2 \times 2 \times 2$ のsupercell。(c) (b)の格子間位置にLiを1つ挿入したSiCのsupercell。

代表発表者 安田 恒輝(やすだ こうき)
所 属 東北大学 工学部 材料科学総合学科
知能デバイス材料学専攻
情報デバイス材料学講座
エネルギー情報学分野 高村・石井研究室
問合せ先 〒980-8579
仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-02-405
TEL/FAX : 022-795-3939
E-mail : yasuda.koki.s8@dc.tohoku.ac.jp

■キーワード: (1)リチウムイオン電池
(2)第一原理計算
(3)固体イオニクス
■共同研究者: 高村 仁(東北大学)
石井 暁大(東北大学)