プロジェクト名	超精密結晶構造解析技術によるエネルギー材料の構造-特性相関解明と高性能化指針の構築
代　表　者	材料エネルギー学部　助教　廣井慧
達成に資するSDGs 目標	No. 7, 8, 9, 11, 13
プロジェクトの意義、成果及び波及効果	本プロジェクトでは、申請者が提案・開発した超精密結晶構造解析技術である【結晶 PDF 全空間精密化法】を研究の中心に据え、リチウムイオン電池材料・熱電変換材料等カーボンニュートラルに強く寄与する材料開発を、原子レベルの構造決定を通じて加速させる。さらに、結晶 PDF 全空間精密化法の改良・発展を通じて、従来困難であった局所構造の定量解析および動的構造変化の追跡を可能とし、結晶構造解析の新たな標準手法として確立する。 Pair Distribution Function（PDF）解析は元来、アモルファス材料や液体などの構造不規則形材料の原子配列の解明に用いられてきた。申請者は 2020 年に、PDF を利用する全く新しい結晶構造解析技術を独自に開発して以降、リチウムイオン電池材料・熱電変換材料・ナノ粒子触媒などの機能性材料で、既存技術では見えなかった原子レベルの構造変化の可視化に初めて成功し、機能解明につながる知見を提供してきた。本プロジェクトでは、結晶 PDF 全空間精密化法の【利用・普及・改良】により、島根大学、ひいては日本国の材料開発研究基盤のレベルを一段引き上げ、【SDGs No.9 産業と技術革新の基盤をつくろう、No. 8 働きがいも経済成長も】に貢献する。さらに、解析技術の発展として時分割 PDF 測定を組み合わせ、化学反応中の原子配列変化を詳細かつ高精度に観測し解明する。この技術の具体的応用先にはリチウムイオン電池が挙げられ、電池特性向上につながる指針構築を行うことで、【SDGs No.7 エネルギーをみんなに そしてクリーンに、 No. 11 住み続けられるまちづくりを、No. 13 気候変動に具体的な対策を】への貢献を目指す。 プロジェクトの意義・成果及び波及効果は、以下の 2 点である。 1. 超精密結晶構造解析を普及させ、材料開発研究基盤を確立する。 結晶構造解析のうち最も成功しているのは Rietveld 法であり、すでに 50 年以上も結晶の X 線回折データの解析に利用され続けている。本プロジェクトの中心である結晶 PDF 全空間精密化法は Rietveld 法の解析限界を突破でき、リチウムイオン電池材料などの【乱れた結晶構造】の解析を実現する。本プロジェクトの遂行により、結晶 PDF 全空間精密化法の性能を示すほか、あらゆる材料に適用できるようソフトウェアの改良を行い、広く材料研究グループへの普及を目指す。開発した解析手法およびソフトウェアは、ユーザーフレンドリーな形で整備し、チュートリアルやワークショップを通じて研究者へ広く普及させることで、分野横断的な利用と標準化を促進する。その波及効果は、従来の Rietveld 解析では見過ごされていた原子レベルでの構造変化を観測可能となることで、材料開発への知見の発見につながると期待される。ゆえに、電池材料に限らず、触媒、熱電変換材料、ナノ粒子などの広範な機能性材料に適用可能であり、材料科学全体における構造解析基盤の高度化に波及する。 2. エネルギー関連材料の構造-特性相関の解明と高性能化指針の構築 申請者は既に結晶 PDF 全空間精密化法を一部のリチウムイオン電池関連部材に対して適用することで、電池特性に直結する特異な構造変化の検出に成功している。本プロジェクトでは放射光施設が提供する最新の測定技術（時分割 PDF 測定）と結晶 PDF 全空間精密化法を有機的に結びつけることで、充放電によって生ずるリチウムイオン電池材料の構造変化や崩壊の過程を詳細に観測する。この実験・解析の成功はリチウムイオン電池の充放電容量や劣化の起源に対する解を提供し、電池特性の改善にブレイクスルーを起こす可能性がある。本研究で得られる構造-特性相関の理解は、リチウムイオン電池の長寿命化および高エネルギー密度化に直接寄与し、電池廃棄量の削減や再生可能エネルギーの安定利用を促進する。これにより、カーボンニュートラル社会の実現に向けた基盤技術の確立に貢献する。リチウムイオン電池は広く普及した技術であるため、この影響は計り知れず、さらには EV 車載用や定置用電源等の大容量蓄電設備への応用が生まれていくと期待される。 本プロジェクトは上述に従い、方法論の高度化および材料応用の双方から複数の国際誌論文創出を計画しており、研究成果の国際的発信と学術的インパクトの創出を実現する。また、島根大学における先端構造解析技術の中核的拠点を形成し、学内外の研究者との連携を強化することで、国際共同研究の推進および大型外部資金獲得の基盤構築に寄与する。また、産業界との連携を通じて、材料開発プロセスの高度化および開発期間の短縮にも寄与することが期待される。

実施体制	担当部局名・職名・氏名	役割
	材エネ・助教・廣井慧	研究総括、分析実験、解析、論文執筆
	自然科学・学生(M1)・Swarup Kumar	解析技術開発、論文執筆
	徳島大学・教授・大石昌嗣	試料合成、解析、論文執筆
	大阪公立大学・教授・小菅厚子	試料合成、解析、論文執筆