

2030年代の主演「全固体電池」

～全固体電池 分析・試験サービス～

クリアライズでは、解析シミュレーションを実装した、全固体電池評価サービスを展開いたします。大気非暴露環境下においてサンプリングを行い、電子顕微鏡 (SEM・STEM) による形態観察、X線回折(XRD)や中性子回折(ND)、核磁気共鳴 (NMR) による構造解析、電池としての性能評価である電気化学計測 (充放電サイクル試験・電気化学インピーダンス分光法) 等、豊富なラインナップにより皆様のニーズにお答えします。

解析シミュレーションを実装した全固体電池評価サービス

電気化学計測
電池性能評価

NMR
イオン伝導度

XRD, ND
結晶構造

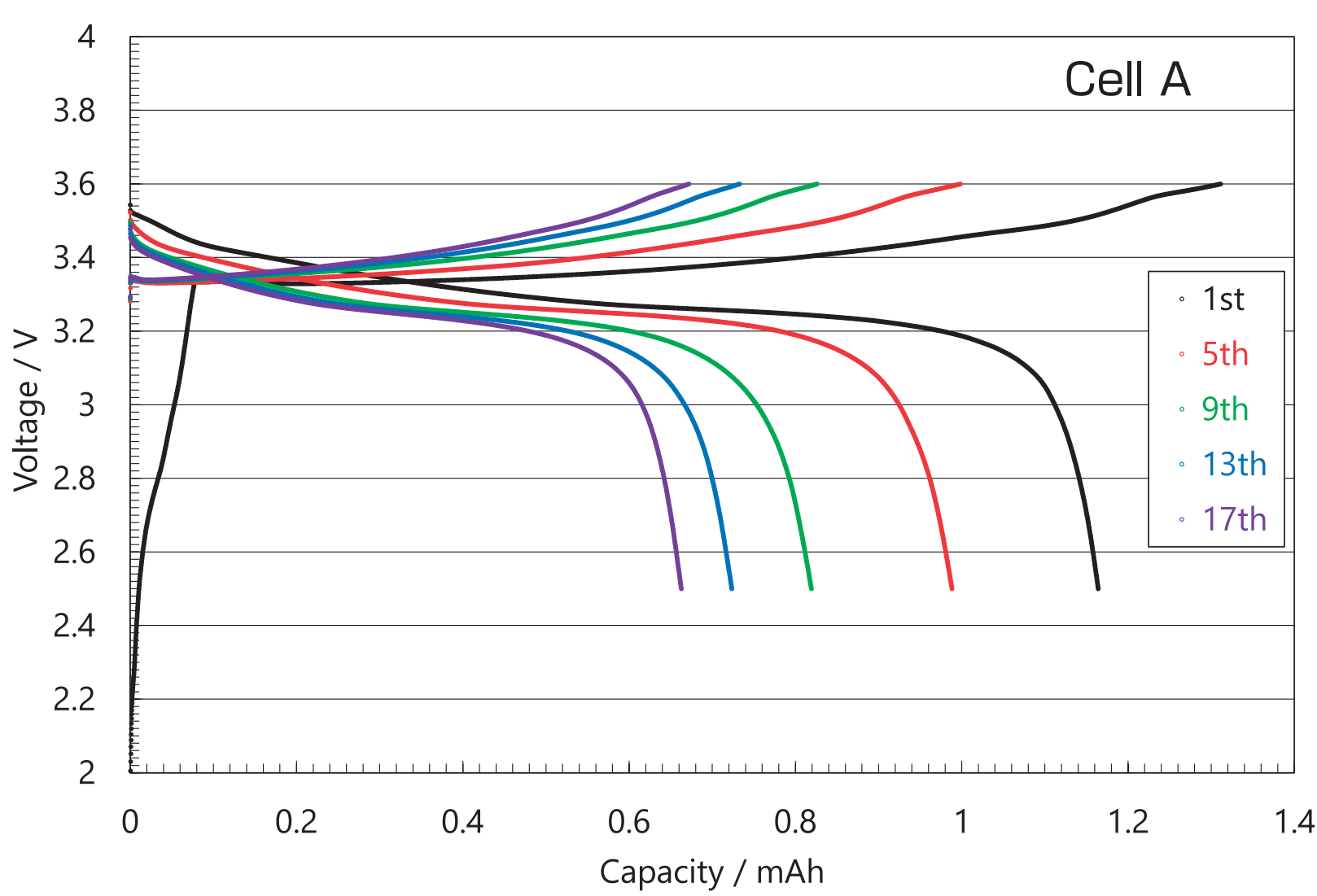
計算科学を用いた相関性の裏付け

分析結果の高精度化

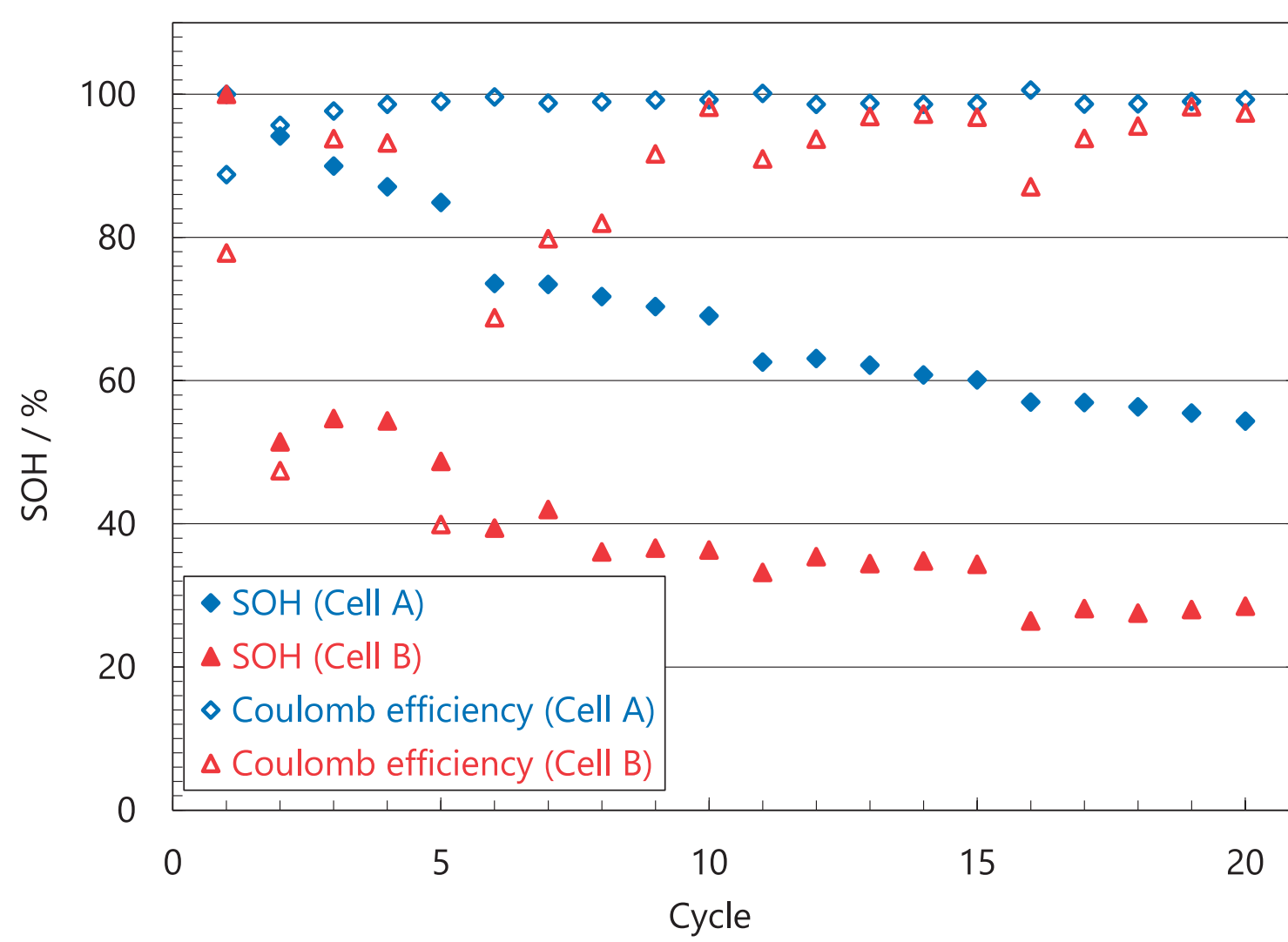
解析シミュレーションを用いた
分析結果の検証及び理論的裏付け

●電気化学試験 (電池性能評価)

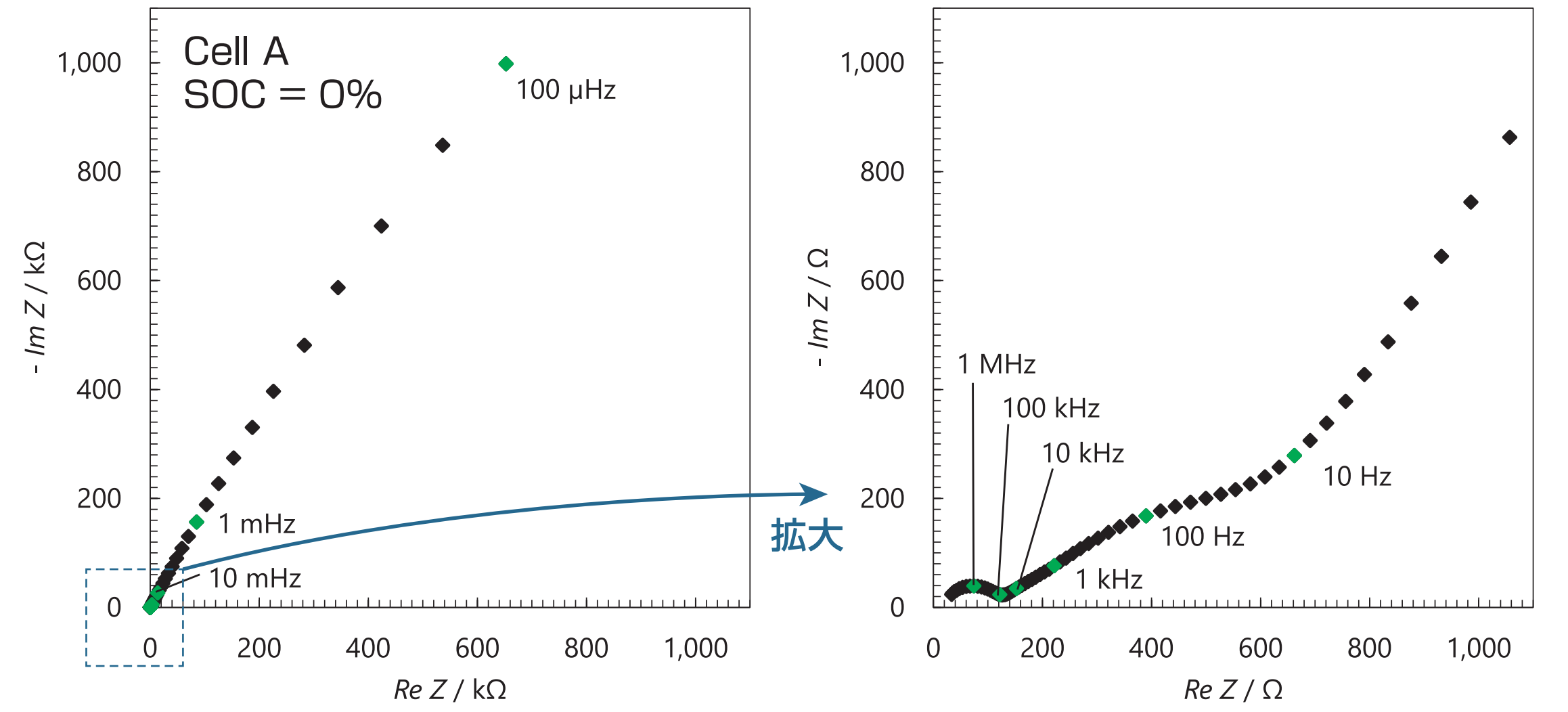
- ・充放電サイクル試験によるサイクル特性評価 (電池容量の低下度評価)
- ・電気化学インピーダンス分光法による内部抵抗の分離評価 (等価回路によるフィッティング)



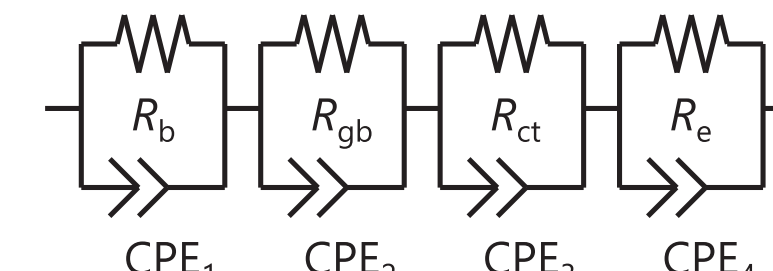
充放電曲線



充放電サイクル特性評価 (SOH, クーロン効率)



電気化学インピーダンス分光法 (Nyquistプロット)

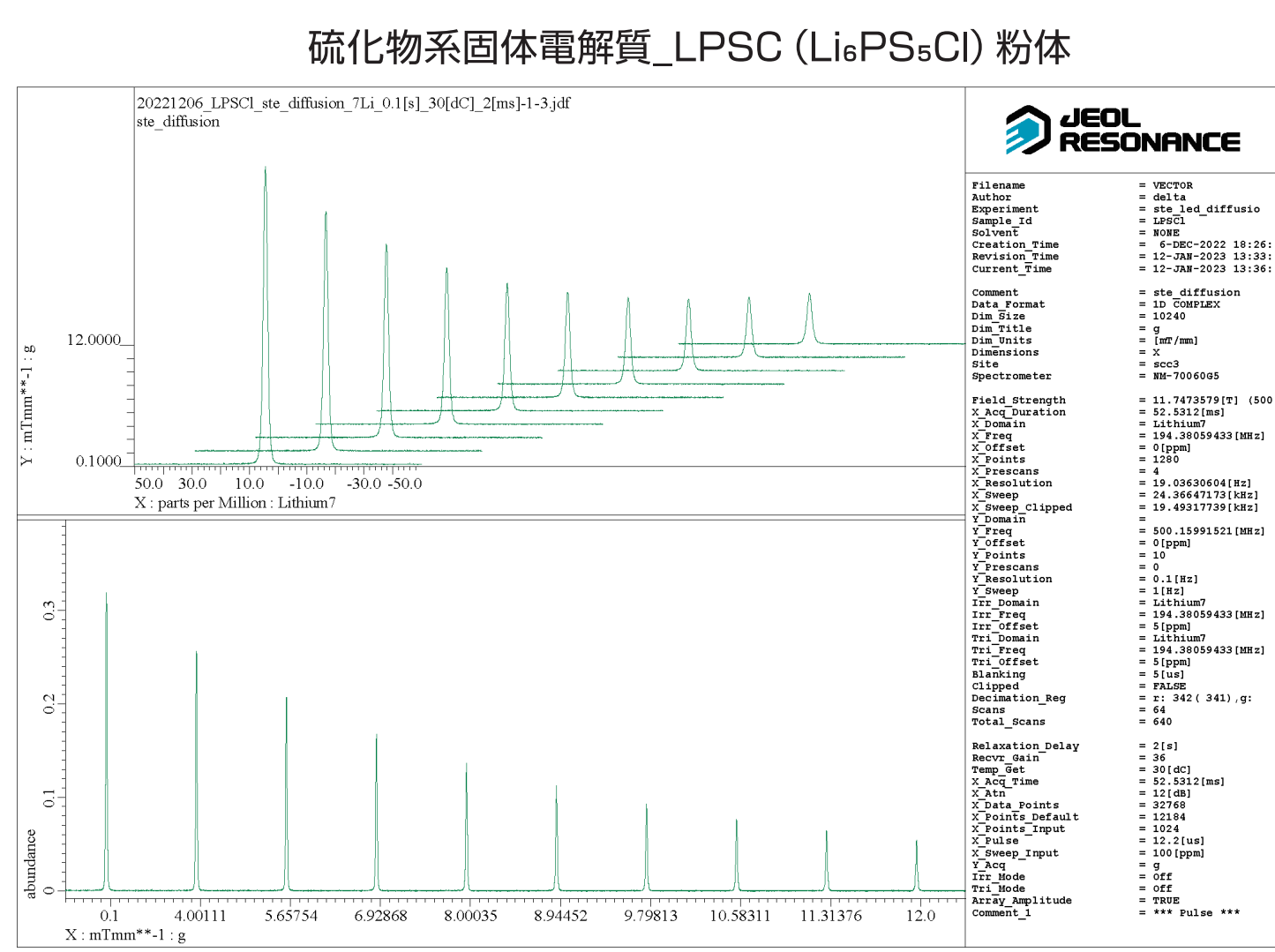


- 固体電解質におけるバルク抵抗: $R_b = 10\Omega$
- 固体電解質における粒界抵抗: $R_{gb} = 130\Omega$
- 固体電質/電極界面の電荷移動抵抗: $R_{ct} = 760\Omega$ (電極内のリチウムイオン拡散抵抗 R_{diff} を含む)
- 電極内の電子抵抗: $R_e = 5.8M\Omega$

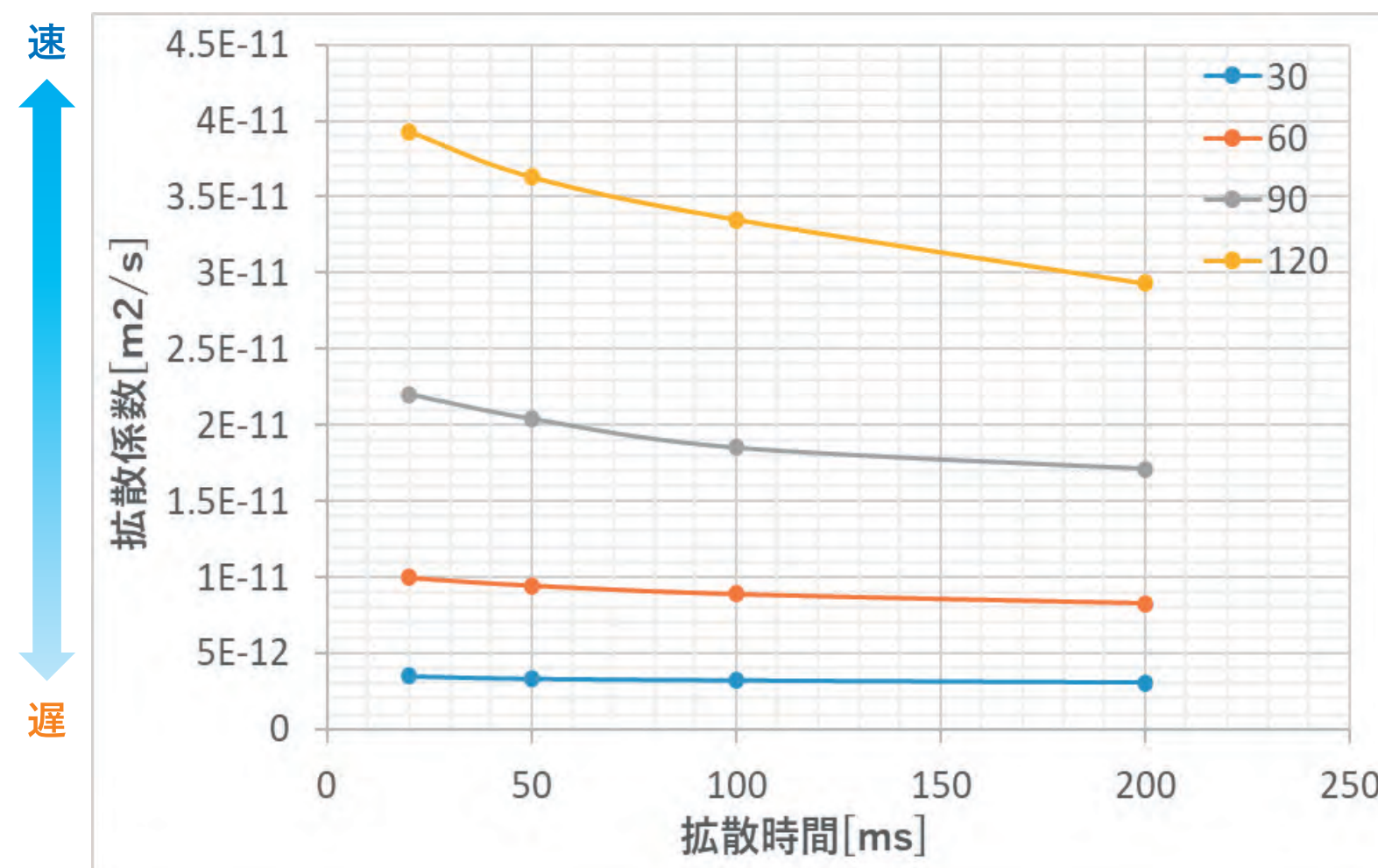
●イオン伝導度評価 (PFG-NMR_拡散係数測定)

核磁気共鳴分析装置 (NMR) を用いて、固体電解質の構造解析とイオンダイナミクス (拡散係数と緩和時間) を評価

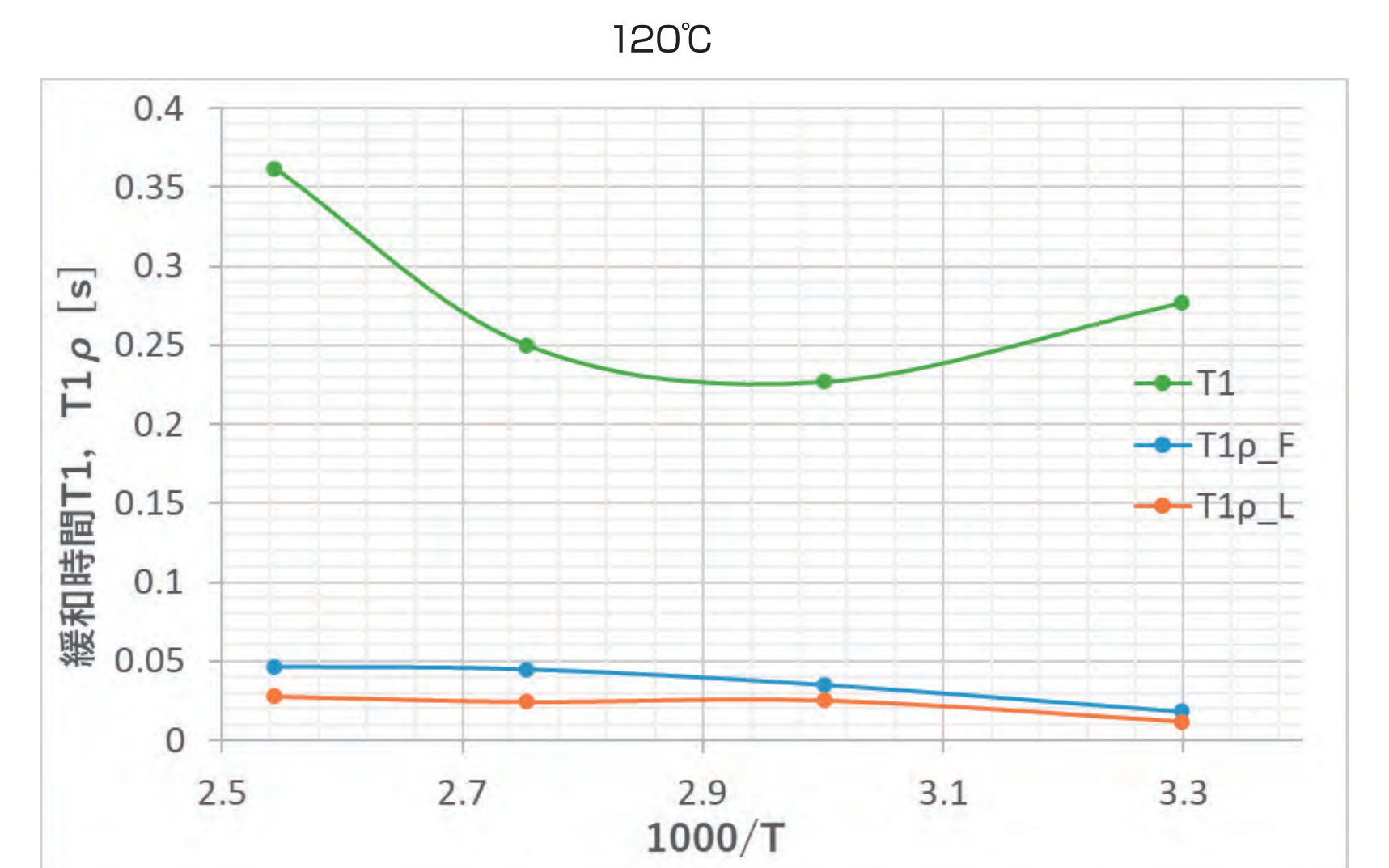
NMRによる拡散測定のメリット
分子の並進運動を拡散係数という物理量で直接観測出来る。



PFG-NMRによる拡散係数測定



PFG-NMRによる拡散係数測定結果

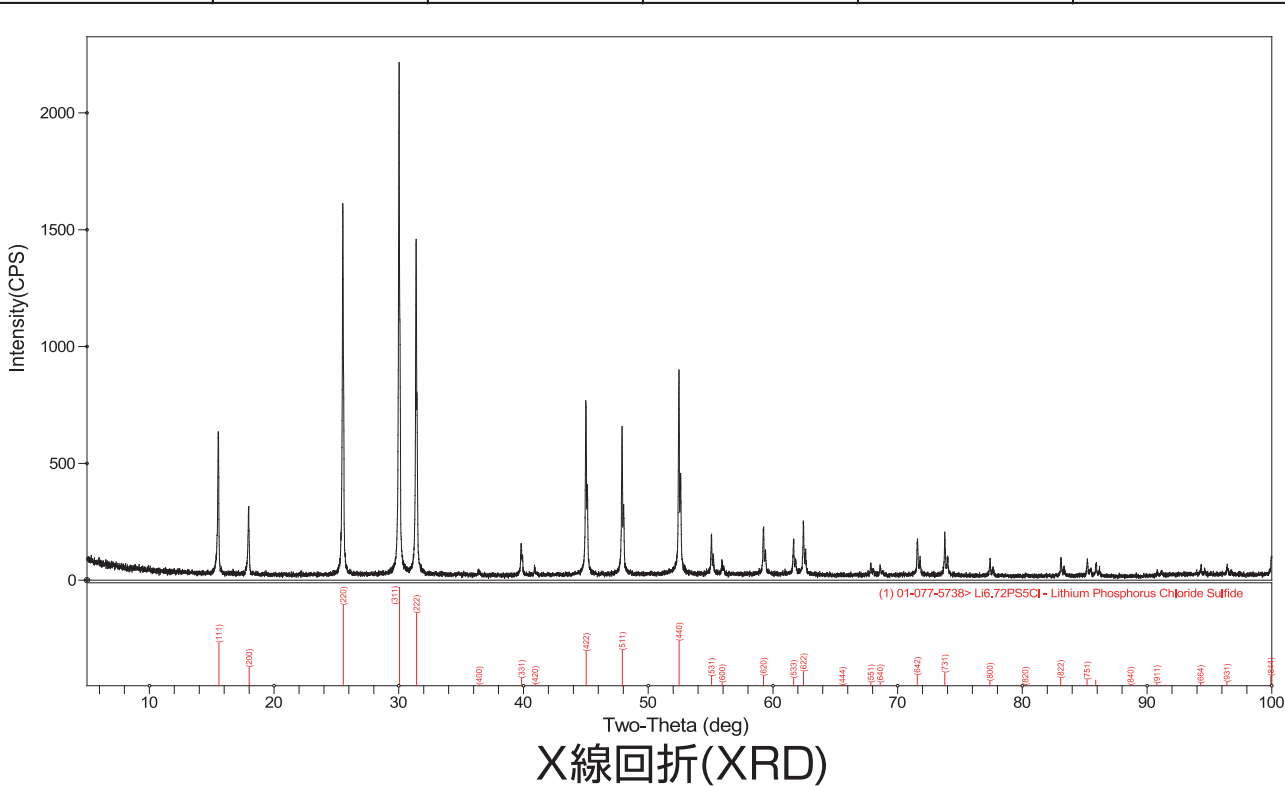


緩和時間 T1, T1ρ 測定結果

●結晶構造解析 “NEXT STEP”へのチャレンジ

大強度陽子加速器施設 (J-PARC) の中性子ビームライン (iMATERIA) とラボ用X線回折装置にてデータを取得し、リートベルト法による結晶構造解析を実施。Liなど軽元素の占有率・サイト情報評価にチャレンジしています。

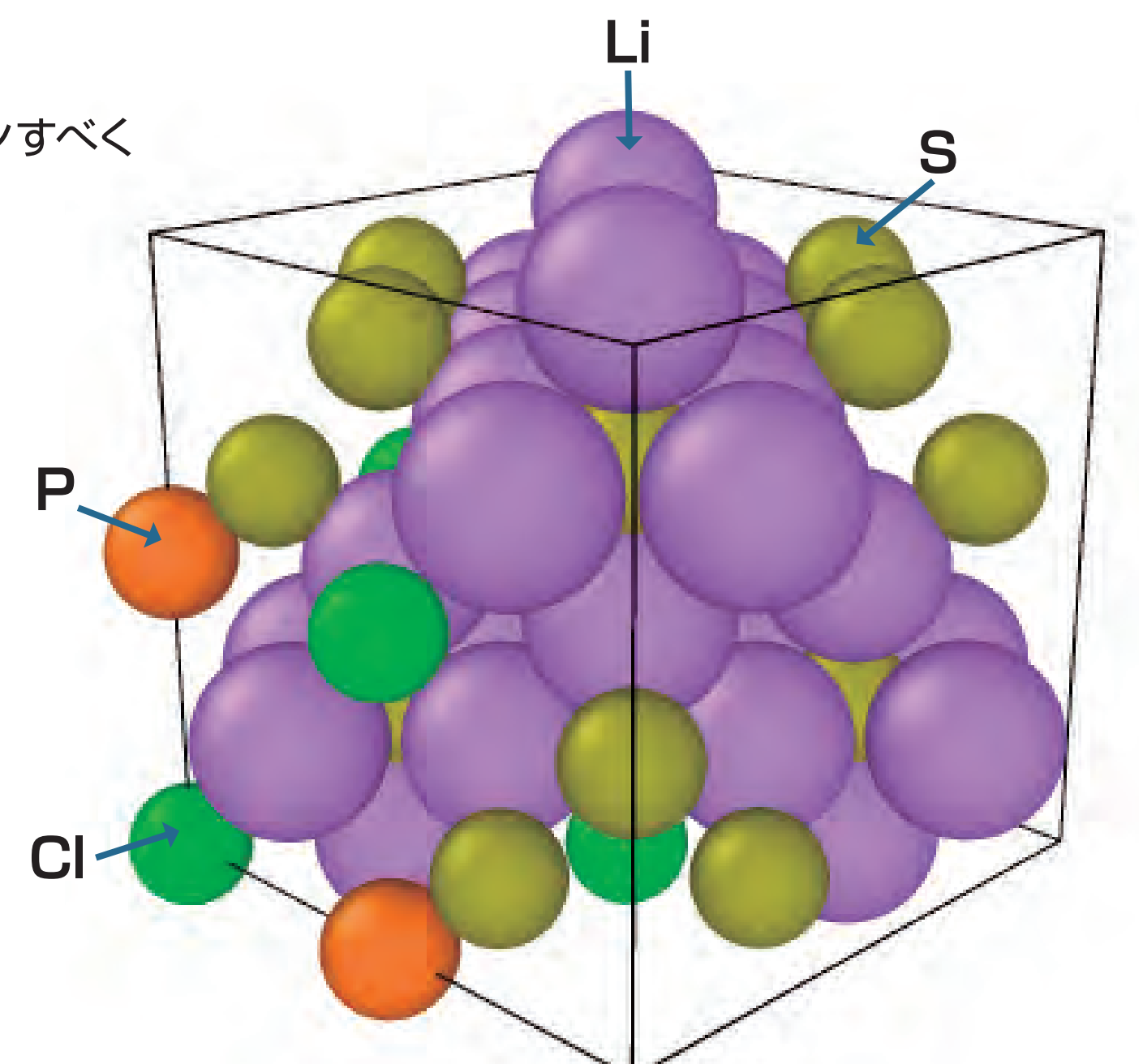
元素名	サイト名	原子座標(x)	原子座標(y)	原子座標(z)	占有率(-)
Li1+	4b	0	0	0	1
Cl1(0.5):S(0.5)	4d	0.75	0.75	0.75	1
P	4b	0	0	0.5	0.805
S	16e	0.1199	-0.1199	0.6199	0.909



・対象試料: 硫化物系固体電解質_LPSC(Li₁₀PS₄Cl)
・結晶構造解析ソフト: [Z-Rietveld]

●解析シミュレーション

最適な全固体電池構成部材の分子構造をデザインすべく解析シミュレーションにチャレンジしています。



Materials Explorer: mp-985592 (ベースモデルの固体電解質)