

平成 25 年 6 月 5 日

研究開発部門 担当者様

共同研究の御提案

拝啓 時下ますますご清栄のこととお喜び申し上げます。

此の度、弊社は、現在、東京大学生産技術研究所、佐藤文俊教授の御指導の下、「大規模量子化学計算によるリチウムイオン電池電極材料の特性評価(仮)」に関する研究をスタートさせようとしております。本研究テーマは、従来、技術的問題となっていたリチウムイオン電池の電極材料の最適化に関する新しいアプローチであり、学術的にも、産業的にもインパクトのある成果が期待されますが、其の為には、リチウムイオン電池関連メーカー様との共同作業が不可欠と認識致しております。

弊社、および、東京大学生産技術研究所、佐藤文俊研究室は、この分野においてトップメーカーであられる御社に、共同研究へご参加頂けないか、ご提案申し上げます次第です。

[共同研究概要]

(1)[共同研究の目的]

東京大学生産技術研究所、佐藤文俊研究室には、大規模量子化学計算に関する長年蓄積されて来た技術保有しております。弊社には、過去にイオン電池のシミュレーション業務に携わった経験が有り、この分野に関しての実績的知見を持っております。これらを組み合わせれば、これまで生体分子等のナノクラスターの解析にしか使用されていなかった大規模量子化学計算を、イオン電池の解析や改良に適用できる可能性が生じます。

しかし、私共には、生産現場での技術の蓄積が有りません。私共は、大規模量子化学計算によって得られる理論的な結果と、生産現場での実験的な技術とを、互いにフィードバックさせ合いながら、イオン電池に関する新しい知見を得ることを目指しています。そして、最終的には、リチウムイオン電池の実際の開発業務に役立つ、新たな研究成果を得ることが出来ればと考えています。

このような、リチウムイオン電池開発における、実用的な技術革新を目標とする研究を実現するには、本格的なリチウムイオン電池メーカーである御社様の協力が不可欠と考えますが、ご検討を頂けませんでしょうか？

(2)[大規模量子化学計算でリチウムイオン電池の何を調べるか]

近年、リチウムイオン電池の正極材料として、 LiMPO_4 で表される化合物を使うことが検討されています。ただし、この化学式の M には、Mn, Fe, Co, Ni 等の様々な遷移金属元素が入ります。これらの化合物は、どれも結晶構造は同じなのに、遷移金属の種類によって、イオン電池としての性能が、非常に異なることが知られています。具体的には、Fe の場合、イオン伝導のレートが極めて優れているのに、Mn の場合、レートは非常に劣ったものとなります。こ

これらの化合物は、オリビン構造と呼ばれており、最近になって、第一原理計算によって、Li イオンの伝導の様子等が解明されつつあります。

本共同研究では、東京大学生産技術研究所、佐藤文俊研究室の保有する、量子化学計算(密度汎関数法による巨大分子全電子計算プログラム)のノウハウを活かして、正極材料としてのオリビン化合物の特性解明を試みます。

しかし、このような研究手法は、あくまで数値計算の結果がどのようなになるかを調べているにすぎません。シミュレーション結果が、実際の物理系に適用出来るか否かを判断するにはリチウムイオン電池開発・生産現場での実験結果との相互比較が不可欠です。これにより、理論と実験のバランスの取れた共同研究が可能であると認識致しております。

将来的には、オリビン化合物だけにとどまらず、スピネル化合物にも視野を広げて、量子化学計算による電極特性の解明する機会が与えられたら、まことに幸いと考えています。更には、リチウムイオン電池に限らず、一般の二次(充電用)電池、燃料電池等の材料の電子状態を第一原理的な数値計算手法で調べる事で、製品の性能向上を目指したいと考えます。

(参考文献：中山将伸、脇原将孝「第一原理バンド計算によるリチウムイオン電池正極材料 LiMPO_4 (M=Mn, Fe, Co, Ni) のバルク特性の研究」 *Electrochemistry*, Vol. 76 (2008) No. 10, PP 752-762.)

(3)[本共同研究が、リチウムイオン電池メーカーである御社に、どのようなメリットをもたらすか、以下の如く予想しております]

リチウムイオン電池の電極材料開発は、試行錯誤の実験の積み重ねが大きいと考えられます。しかし、第一原理計算等で得られた電極材料の物性予測データが手元に有れば、これらの知見を参考にして電極材料・構造の最適化が進み、実験手法・対象物の絞り込みが可能となり、製品開発期間の短縮が期待出来ると考えられます。

第一原理計算に関して述べますと、これまでは、平面波基底を使用する物理の方法が用いられて来ましたが、遷移金属の取り扱いに適切な量子化学の方法を導入することにより、従来より信頼性の高い解析が期待できます。また、数値計算シミュレーションにより、充電池内部のイオン電導の様子が解明されれば、リチウムイオン電池の設計にも大いに役立つことが期待されます。

いずれにせよ、本研究テーマでは、理論的な数値計算シミュレーション結果が、どこまで、具体的な生産技術の改良に寄与できるかが、現場での業務知見を基に評価出来る事が大切なポイントになると考えています。其の為には、リチウムイオン電池の実験現場での開発業務で得られる知識と、理論的な数値計算技術を融合・組み合わせることが必要不可欠と、申し上げます次第です。

大変、突然な申し出であり、御社が、私共と共同研究を行うか否かについては、さらなるご検討が必要かと拝察申し上げます。

疑問・ご質問等、意見交換の機会を、御社のご意向に添わせて頂き、佐藤先生、弊社一緒に十分な協議をさせて頂きましたら嬉しい限りで御座います。

更には、以下のホームページに、東京大学生産技術研究所、佐藤文俊研究室、および、弊社の技術情報が開示されております。これらを参考にして頂ければ幸いです。

東京大学生産技術研究所、佐藤文俊研究室：

<http://satolab.iis.u-tokyo.ac.jp/>

<http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/>



どうか、よろしくご検討の程、お願い申し上げます。

敬具