

固体型ナトリウム硫黄二次電池

充放電機構を解明

阪大と京大

大阪大学産業科学研究所と京都大学触媒・電池元素戦略ユニットの研究グループは、固体型ナトリウム硫黄二次電池の詳細な充放電機構を明らかにした。固体硫黄やナトリウム多硫化物に関する電子論的な基礎物性に理解を与え、ナトリウム硫黄電池の性能を理論的に予測することにつながる。日本物理学会が発行する英文物理学誌JPSJ12月号に掲載された。

「硫黄やナトリウム多硫黄」安定性を、量子論に基づいて調べた。固体型ナトリウム硫黄電池の電子構造や相転移の第一原理計算から詳細な電子構造や相転移のメカニズムは謎だった。

放電反応式を明らかにし、理論的に予測される電圧と放電容量の特性を初めて解明した。

電圧（起電力）と放電容量は電池性能を測るうえで重要な指標。これらの指標を理論的に予測する

るには、充電・放電反応によって電極内部に生成される物質を特定し、電極反応式を突き止める必要がある。ナトリウム硫黄系固体物質は、元素組成比に依存して多様な原子構造を取ることが知られているが、基礎的な電子構造や構造間のエネルギー安定性はこれまで分かっていなかった。

高いエネルギー密度を持ち、次世代の蓄電池として期待されるナトリウム硫黄電池は商用化が進みつつある。動作温度は

約300度Cと高温で、固体電解質で隔てられたナトリウム負極と硫黄正極は液体状態で使われる。

最近、室温動作を目指した固体型ナトリウム硫黄電池の基礎研究も始まった。

りつつあるが、その詳細な電池性能や充放電の微視的なメカニズムは謎だった。