

報道機関 各位

国立大学法人電気通信大学

UCr₄C₄構造をもつ軽元素主体の新規固体電解質 RbLi(Li₃SiO₄)₂を発見 —全固体電池の軽量化と高速充電を導く新しい材料デザイン指針—

【ポイント】

* 軽元素を中心とした新構造の発見

：従来の酸化物固体電解質より約 46%軽量（理論密度 2.74 g/cm³）な、結晶構造フレームワーク「UCr₄C₄ 型」の RbLi(Li₃SiO₄)₂ が、優れたリチウムイオン伝導体として機能することを世界で初めて解明しました。

* 高速移動のポテンシャルを実証

：第一原理計算により、結晶内のすき間をリチウムイオンが移動する際のエネルギー障壁が 0.30 eV と極めて低いことを確認し、実用が期待されている材料に匹敵する高速移動能力を持つことを突き止めました。

* 性能向上の明確なカギを獲得

：イオンの移動自体はスムーズである一方、結晶欠陥の形成が伝導のネックになっていることを解明し、リチウム過剰な組成にする今後の改良方針を提示しました。

【概要】

電気自動車や電子機器の安全性を飛躍的に高める「全固体リチウム電池」の実現に向け、軽量で優れたイオン伝導性を持つ固体電解質（※1）の開発が望まれています。日亜化学工業株式会社の市川諒英氏（電気通信大学大学院情報理工学研究科先進理工学専攻博士前期課程 2015 年修了）と電気通信大学大学院情報理工学研究科基盤理工学専攻の中村淳教授らの共同研究チームは、「UCr₄C₄ 型（※2）」の結晶構造をもつ、軽元素中心で構成される化合物 RbLi(Li₃SiO₄)₂ を合成し、そのリチウムイオン伝導特性と詳細な伝導機構を初めて解明しました。

実験と計算科学を組み合わせた解析により、結晶内をイオンが移動する際のエネルギー障壁が 0.30 eV と極めて低いことが判明しました。現在の試作品では欠陥形成が伝導の制限要因（律速段階）となっていますが、リチウム過剰な組成設計を行うことで高導電率化できるという明確な指針が得られました。RbLi(Li₃SiO₄)₂ は LED 用緑色蛍光体の母体材料としても期待されており、本研究により、発光材料としての可能性に加え、固体電解質としての新たな機能が明らかになりました。本成果は、軽量で安全な次世代全固体電池の開発に新たな選択肢を与えるものです。

【背景】

現在主流のリチウムイオン電池は液体電解質を使用しているため発火リスクがありますが、これを固体のセラミックスなどに置き換えた「全固体電池」は安全性が高く、急速充電も可能になると期待されています。特に大気中で扱いやすい酸化物系の固体電解質が注目されていますが、従来知

られている代表的材料（Garnet 型 $\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$ ）はランタンやジルコニウムといった重い元素を含むため、密度が約 5.12 g/cm^3 と大きく、電池全体の軽量化（重量エネルギー密度の向上）に限界がありました。そのため、軽元素を中心に構成された固体電解質の開拓が求められていました。

【手法】

研究チームは、主に軽元素からなる化合物 $\text{RbLi}(\text{Li}_3\text{SiO}_4)_2$ （理論密度 2.74 g/cm^3 ）に着目し、固相反応法を用いて多結晶粉末および焼結ペレットを合成・評価しました。さらに、量子力学に基づく第一原理計算（※3）、およびニューラルネットワーク分子動力学シミュレーション（※4）を融合させ、リチウムイオンが結晶内をどのように移動しているかを原子レベルで視覚化・解析しました。

【成果】

本研究により、以下の重要な知見が得られました。

・ 3 次元的な伝導ネットワークの解明

： $\text{RbLi}(\text{Li}_3\text{SiO}_4)_2$ は単斜晶系の「 UCr_4C_4 型」構造をとり、b 軸方向に沿ってトンネル状の 1 次元リチウムチャンネルが形成されています。分子動力学シミュレーションの結果、このチャンネル同士が連結して 3 次元的な伝導経路を形成しており、一部に欠陥があってもイオン移動が遮断されにくい構造であることが分かりました。

・ 極めて低いイオン移動障壁 (0.30 eV)

： 計算科学解析により、結晶のすき間（間隙位置）に入ったりチウムイオン（間隙リチウム（※5））が移動する際のエネルギー障壁はわずか 0.30 eV であることが判明しました。これは、隣接するリチウムイオン同士の電気的反発力を利用して押し出されるように動く（協奏運動）ためであり、実用が期待されている材料である $\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$ (0.26 eV) や $\text{Li}_{1.3}\text{Al}_{0.3}\text{Ti}_{1.7}(\text{PO}_4)_3$ (0.27 eV) に匹敵するトップクラスに低いイオン移動障壁です。

・ 性能を引き出すための課題と解決策

： 現在の化学量論組成では、イオン移動の前段階となる「結晶欠陥（フレンケル欠陥（※6））の形成」に必要なエネルギー (1.26 eV) が高く、これが全体のリチウムイオン伝導度 (150°C で $2.9 \times 10^{-8} \text{ S/cm}$) の制限要因になっていることを突き止めました。すなわち、合成時にリチウム過剰（Li-rich）な組成にするなどの工夫により欠陥形成の障壁をバイパスできれば、本来持っている 0.30 eV という高速伝導のポテンシャルをフルに引き出せることが示されました。

【今後の期待】

本成果は、これまで見過ごされていた UCr_4C_4 型構造が優れたリチウムイオン伝導骨格であることを示した画期的な発見です。今後はリチウム量の最適化による高伝導度化や、粒子間の緻密性を高める製造プロセスの最適化を進めることで、軽量かつ安全で高出力な全固体電池の実現へ大きく貢献することが期待されます。

（論文情報）

論文タイトル： UCr_4C_4 -Type $\text{RbLi}(\text{Li}_3\text{SiO}_4)_2$: A New Solid Electrolyte Framework for Fast Li-Ion Conduction

著者名： Akihide Ichikawa*, Sadakazu Wakui, Takumi Seihara, Yudai Yokoyama, Haruka Tsubohira, and Jun Nakamura*

掲載雑誌： Advanced Functional Materials

DOI： 10.1002/adfm.78600

公表日： 2026 年 9 月 24 日

(謝辞)

本研究は、文部科学省「マテリアル先端リサーチインフラ (ARIM)」事業 (課題番号 : JPMXP1225UE5292) の支援を受けて実施されました。

(用語説明)

※1 : 固体電解質

電池の内部で正極と負極の間に位置し、リチウムイオンのみをスムーズに移動させる役割を持つ固体の材料。可燃性の液体電解質と違って燃えないため、電池の安全性を大幅に高められます。

※2 : UCr_4C_4 型

ウランとクロムの化合物で初めて見出された結晶構造パターン。本研究では、この構造内に形成されるリチウムのトンネル構造 (チャネル) がイオン伝導に優れていることを発見しました。

※3 : 第一原理計算

量子力学や原子間相互作用の物理法則に基づき、実験データに頼らずコンピュータ上で物質の電子状態を極めて正確に計算・視覚化する手法です。

※4 : ニューラルネットワーク分子動力学シミュレーション

原子間の相互作用 (ポテンシャルエネルギー) をニューラルネットワークで学習・推論し、従来の第一原理計算並みの高精度を保ちながら原子の運動の様子を高速計算する手法です。

※5 : 間隙リチウム

結晶の基本格子点から外れたすき間に入り込んだリチウムイオン。周りのイオンからの押し出し (クーロン反発力) を受けて極めて低いエネルギーで移動できます。

※6 : フレンケル欠陥

格子上の原子がすき間 (間隙位置) へ移動することで、元の場所に空孔 (穴) と間隙原子がセットで生じる結晶欠陥のことです。

【連絡先】

<研究内容に関すること>

電気通信大学 大学院情報理工学研究科

【職名】 教授

【氏名】 中村 淳

Tel : 042-443-5156 E-Mail : jun.nakamura@uec.ac.jp

日亜化学工業株式会社 横浜研究所

【氏名】 市川 諒英

E-Mail : akihide.ichikawa@nichia.co.jp

<報道に関すること>

電気通信大学 総務部 総務企画課 広報係

Tel : 042-443-5019 Fax : 042-443-5887

E-Mail : kouhou-k@office.uec.ac.jp

日亜化学工業株式会社 総務部 総務広報課
Tel : 0884-22-2311 FAX : 0884-23-7717
E-Mail : pr_hq@nichia.co.jp