

原子・分子の自在配列・配向技術と分子システム機能
2021 年度採択研究代表者

| |
|------------------|
| 2021 年度 年次報告書 |
|------------------|

是津 信行

信州大学 学術研究院(工学系)
教授

固液電気化学相界面の多階層構造制御

§ 1. 研究成果の概要

是津グループでは、『配置エントロピーの増大による準安定相界面の活用』に注力し、充電深度の深い脱リチウム組成における不可逆的相転移の抑制や配置エントロピーの増大による中間組成の安定化、電解液界面におけるイオン交換反応の高速化など、電極活物質の複合アニオン化によってもたらされる構造変化、およびそれに付随する相関イオン拡散ダイナミクスにもたらされる効果を明らかにした。複合アニオン化合物の特徴として、これまでに報告例のなかった新しい特徴を見出した。

長尾グループでは、『安定化された異方的ポテンシャルや階層構造の周期性が連続的に変化する動的な連続体媒体の活用』に注力し、リチウムイオンの輸送が液晶の連続媒体によって次元制御できる可能性が示した。その他、中性子反射率測定および古山グループとの連携による汎用ニューラルネットワークポテンシャルを活用した二分子間相互作用モデル解析結果から、液晶性固体電解質が界面近傍においてバルクで知られているラメラ構造とは異なる構造を形成する可能性を明らかにした。

古山グループでは、充電時のリチウムイオンの脱離反応による NCM523 内部の構造変化、NCM523 表面の差ラムモデルを用いた計算系、ASPI 分子間の相互作用とその配向性解析を対象に、汎用ニューラルネットワークポテンシャルを活用した計算結果の計算精度の検証に注力した。第一原理計算や実験結果と比較し、高い一致性を示したことから、十分な精度で評価すると判断した。加えて、本提案で目指す活物質界面垂直なイオンチャンネルの形成のための分子設計指針の提案に着手した。

中期の目標達成に向けて研究のおおまかな方向性に目途をつけることができた。また、成果の一部は民間企業に特許実施許諾し、2022 年度内に研究用試薬として販売する予定にある。以上のことから、2021 年度の研究進捗状況は当初の計画以上に進展していると自己評価した。

§ 2. 研究実施体制

(1) 是津グループ

- ① 研究代表者: 是津 信行 (信州大学 学術研究院(工学系) 教授)
- ② 研究項目
 - ・ハイエントロピー電極活物質の合成と相間イオン拡散ダイナミクス評価
 - ・複合アニオン化表面電極活物質の合成と相関イオン拡散ダイナミクス制御
 - ・プロトン蓄電池開発のための界面制御技術の開発

(2) 長尾グループ

- ① 主たる共同研究者: 長尾 裕樹 (北陸先端科学技術大学院大学 先端科学技術研究科 教授)
- ② 研究項目
 - ・電極活物質粒子界面のイオン伝導性と分子配向評価
 - ・多階層組織構造制御

(3) 古山グループ

- ① 主たる共同研究者: 古山 通久 (信州大学先鋭領域融合研究群 先鋭材料研究所 教授)
- ② 研究項目
 - ・界面ダイナミクスのための汎用ニューラルネットポテンシャルの検証
 - ・界面制御に向けた界面ダイナミクス