

先端国際共同研究推進事業

2024 年度採択

次世代のための ASPIRE

エネルギー分野

2024 年度 年次報告書（公開版）

研究課題名	濃厚・混合溶媒系熱化学電池の研究と電気化学的窒素 変換への展開を基盤とした国際プラットフォームの構築
日本側研究代表者	山田 鉄兵 東京大学 教授
相手側研究代表者	Alexandr Simonov, Associate Professor, Monash University
研究期間	2024 年 12 月 1 日～2028 年 3 月 31 日

1. 研究成果の概要

① 研究構想にかかる成果

<実施したこと>

Alexandr Simonov 教授とのディスカッションを重ね、ターゲットをジエチルエーテル、ジグリムなどの短鎖 PEG に設定した。またフロリネーテッドエーテルもターゲットとすることとし、それらの溶媒和構造について計算を実施した。学生の派遣時期を 2025 年 7 月に設定した。

<得られた成果>

上記計算の前段階として、メタノール・アセトニトリル混合溶媒中でのキノン誘導体への溶媒和構造について CONFLEX による溶媒和構造出力と Gaussian による構造最適化を組み合わせることで研究を進めた。その結果、溶媒和はキノンの 2 電子還元体で最も強く、1 電子還元体はそれに比べると弱いことがわかった。

混合溶媒系における溶媒和構造の違いをキノン誘導体で評価することで、溶媒和のエネルギーの差がレドックス電位に与える影響を検証した。溶媒和構造については、メタノールとキノンとの会合状況を CONFLEX により探索し、Gaussian による構造最適化によってエネルギーを見積もった。また混合溶媒中における酸化還元電位の溶媒濃度依存性を調べ、溶媒和するメタノール分子数を見積もった。さらに酸化還元電位の温度依存性をしらべ、温度係数を見積もった。すると、メタノールの溶媒和数の増加（正確には、酸化体と還元体の溶媒話数の差の増加）に伴ってゼーベック係数が向上することが明らかになった。この結果は、逆にアルコールの溶媒話数を酸化還元反応の温度依存性により見積もることができることを示唆している。

② 国際頭脳循環の促進にかかる成果

<実施したこと>

Pacifichem（環太平洋国際化学会議）にて熱化学電池に関するセッションを開催し、そこで研究者を集めることを決めた。

第二回熱化学電池国際会議（IWTED）の開催について立候補し、熱化学電池分野の海外（主に欧州）の研究者との開催場所・日程・予算・参加者の調整を行った。

<得られた成果>

上記二つの国際ワークショップ・シンポジウムの開催が決定した。

Pacifichem については Advances in Electrochemical and Liquid-based Thermal Technologies for Waste Heat Utilization and Electricity Storage (#CES003)とのセッションを、韓国 Inha 大学の Tae June Kang および Jianjian Duan との共催で行うことになった。また国立台湾大学にも籍を有する Leigh Aldous を訪問し、彼にも Head quarter に参加してもらい、協力を得ることに成功した。Pacifichem には欧州の参加者は一般には少ないが、Jorge García-Cañadas の協力により、欧州からの参加者を呼ぶことにも成功した。

一方、IWTED については 2025 年 12 月に山田および周が主宰者となり、東京大学で開催することが決定した。前回スペインの会議では参加が難しかった、日本・韓国・台湾などの近隣国からの参加者と、欧州からの参加者を集めることに現段階では成功している。

2. 研究実施体制

研究テーマ	中心となる研究者氏名	所属機関・部署・役職名
研究テーマ1	山田 鉄兵	東京大学・大学院理学系研究科・教授
研究テーマ2	Alexandr Shimonov	モナッシュ大学・化学研究科・准教授
研究テーマ3	周 泓遥	東京大学・大学院理学系研究科・教授

3. 代表的な業績（原著論文、プレスリリース、表彰など）

なし