

2024 年度年次報告書

未踏探索空間における革新的物質の開発

2022 年度採択研究代表者

一杉 太郎

東京大学 大学院理学系研究科
教授

分子結晶全固体電池の創製

主たる共同研究者:

館山 佳尚 (東京科学大学 総合研究院 教授)

守谷 誠 (静岡大学 学術院 准教授)

研究成果の概要

本研究は、高イオン伝導性を示す分子結晶固体電解質の開発と、これを用いた全固体電池の実現を目指している。目標達成に向けて、実験と理論計算を融合させた物質探索と、ロボットや機械学習を用いたハイスループット合成・計測技術の構築に取り組む。

2024 年度に以下の成果を得た。

1. 分子結晶 $\text{Li}\{\text{N}(\text{SO}_2\text{F})_2\}\{\text{NCCH}_2\text{CH}_2\text{CN}\}_2$ と正極材料の界面におけるイオン拡散について、微視的な理解を深めた。得られた知見を活用し、バルク電池動作が可能である見通しが立った。
2. 分子結晶とフィラーを複合化したコンポジット電解質において、高い伝導度を実現した。フィラーの最適量、またフィラー添加による界面化学状態変化に関する実験結果が得られた。
3. イオン相関を考慮した非平衡分子動力学(MD)計算を、さらに高速化することに成功した。分子結晶固体電解質へ適用するための自動計算基盤の構築を進めた。

【代表的な原著論文情報】

- 1) R. Sasaki Y. Tateyama, D. J. Searles, “Constant-Current Nonequilibrium Molecular Dynamics Approach for Accelerated Computation of Ionic Conductivity Including Ion-Ion Correlation”, *PRX Energy*, **4**, 013005 (2025).
- 2) H. Katsuragawa, T. Hitosugi, M. Makoto *et al.*, “Molecular Crystalline Electrolyte Based on $\text{Li}\{\text{N}(\text{SO}_2\text{CF}_3)_2\}$ and Succinonitrile with Closely Contacted Grain Boundary Interfaces Exhibiting Selective Li-Ion Conductivity and 5 V-Class Electrochemical Stability”, *ACS Appl. Energy Mater.* **8**, 3599-3605 (2025).
- 3) Y. Watanabe, S. Kobayashi, M. Moriya, T. Hitosugi *et al.*, “Reduced resistance at molecular-crystal electrolyte and LiCoO_2 interfaces for high-performance solid-state lithium batteries”, *APL Mater.* **13**, 011122 (2025).
- 4) R. Zheng, S. Kobayashi, Y. Tateyama, M. Moriya, T. Hitosugi, *et al.*, “Investigating the Interface of $\text{Li}\{\text{N}(\text{SO}_2\text{F})_2\}(\text{NCCH}_2\text{CH}_2\text{CN})_2$ Molecular Crystal Electrolytes for 5 V Class Solid-State Batteries”, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **17**, 21951-21957 (2025).