

超空間制御に基づく高度な特性を有する革新的機能素材等の創製
平成 27 年度採択研究代表者

| |
|------------------|
| 2018 年度 実績報告書 |
|------------------|

一杉 太郎

東京工業大学物質理工学院
教授

界面超空間制御による超高効率電子デバイスの創製

§ 1. 研究成果の概要

全固体電池や燃料電池等のデバイスにおいて、固体/固体界面近傍におけるイオンの移動を制御することが極めて重要である。しかし、その精緻な制御はいまだ難しい。その理由として、固体/固体界面を扱う過程で発展した半導体物理(固体物理)が、電場印加下におけるイオンの挙動を正確に記述できないということが挙げられる。したがって、固体物理をさらに発展させ、表面・界面科学に立脚した「固体電気化学の学理構築」が急務である(図 1)。

それに向け、2018 年度は三つの研究を行った。1) 新型メモリ開発、2) 全固体電池の界面研究、3) 研究開発を高速化するための AI(人工知能)/Robot-driven Materials Research である。下記に概要を記す。

【1. 新型メモリ開発】

全固体電池は、充電状態と放電状態の二値のメモリデバイスと見なすことができ、実際にメモリとして活用するには、容量を極力小さくすれば良い。本年度、Ni 下部電極と固体電解質の界面のみにイオンを蓄積する超低消費電力型新型メモリの開発を進めた。さらに、ニューロモルフィックメモリーとしての特性を明らかにした。



図 1 本研究の概要と構想

【2. 全固体電池の界面研究】

固体電解質/電極界面の電気抵抗に着目し、その発生メカニズムを明らかにすると共に、抵抗低減に向けた応用研究に取り組んだ。5 V 級正極材料として実用化が期待される $\text{Li}(\text{Ni}_{0.5}\text{Mn}_{1.5})\text{O}_4$ について、界面抵抗が小さくなることを実証した。また理論面からも第一原理計算を進め、界面近傍での Li の振る舞いを明らかにした。

【3. AI/Robot-driven Materials Research (人工科学者)】

材料研究の進め方を変革し、研究を加速することに取り組んでいる。人工知能とロボットを用いた材料開発装置の構築を進めた。

【代表的な原著論文】

1. H. Kawasoko, T. Hitosugi *et al.*, "Extremely Low Resistance of Li_3PO_4 Electrolyte/ $\text{Li}(\text{Ni}_{0.5}\text{Mn}_{1.5})\text{O}_4$ Electrode Interfaces", *ACS Appl. Mater. Interfaces* 10, 27498-27502 (2018).
2. S. Shiraki, T. Hitosugi *et al.*, "Atomically Well-Ordered Structure at Solid Electrolyte and Electrode Interface Reduces the Interfacial Resistance", *ACS Appl. Mater. Interfaces* 10, 41732-41737 (2018).

3. D. M. Packwood and T. Hitosugi, "Material informatics for self-assembly of functionalized organic precursors on metal surfaces", *Nature Commun.* **9**, 2469 (2018).

§ 2. 研究実施体制

(1) 一杉グループ

① 研究代表者: 一杉 太郎 (東京工業大学物質理工学院 教授)

② 研究項目

- ・微小極限における電気化学の妥当性の検証
- ・新型メモリ開発
- ・全固体電池の界面研究
- ・AI/Robot-driven Materials Research

(2) 渡邊グループ

① 主たる共同研究者: 渡邊 聡 (東京大学大学院工学系研究科 教授)

② 研究項目

- ・第一原理計算による、電圧記憶不揮発性メモリーの動作原理解明と材料最適化
- ・量子力学に基づくナノ固体電気化学の構築

(3) 白木グループ

① 主たる共同研究者: 白木 将 (日本工業大学基幹工学部 教授)

② 研究項目

- ・新電子デバイスの実用化に向けた研究、動作原理の検証