

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。

それに向け、2019年度は三つの研究を行った。1) 全固体電池の界面研究、2) 新型メモリ開発、3) 研究開発を高速化するための機械学習とロボットを用いたデジタルラボラトリである。下記に概要を記す。

#### 1. 全固体電池の界面研究

固体電解質-電極界面をイオンがまたぐ際の電気抵抗の低減が急務である。その発生メカニズムを明らかにすると共に、抵抗低減に向けた研究に取り組んだ。この界面においてプロトンが大きな影響を及ぼすことを明らかにし、低抵抗化メカニズムを解明した。

#### 2. 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。

#### 3. 機械学習とロボットを用いたデジタルラボラトリ

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。機械学習とロボットを用

いた材料開発装置の構築を進めた。一つだけのパラメータであるが、自律的に最適化を行い、closed-loop を実証した。

**【代表的な原著論文】**

1. Hideyuki Kawasoko, Tetsuroh Shirasawa, Susumu Shiraki, Toru Suzuki, Shigeru Kobayashi, Kazunori Nishio, Ryota Shimizu, and Taro Hitosugi, “Low interface resistance in solid-state lithium batteries using spinel  $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4(111)$  epitaxial thin films”, ACS Appl. Energy Mater. 3, 1358 (2020).
2. Yuki Watanabe, Shigeru Kobayashi, Issei Sugiyama, Kazunori Nishio, Wei Liu, Satoshi Watanabe, Ryota Shimizu, and Taro Hitosugi, “Low Energy Consumption Three-Valued Memory Device Inspired by Solid-State Batteries”, ACS Appl. Mater. Interfaces 11, 45150-45154 (2019).
3. Koji Shimizu, Wei Liu, Wenwen Li, Shusuke Kasamatsu, Yasunobu Ando, Emi Minamitani, and Satoshi Watanabe, “First-principles study of Li-ion distribution at  $\gamma\text{-Li}_3\text{PO}_4$ /metal interfaces”, Phys. Rev. Materials 4, 015402 (2020).

## § 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
- ・機械学習とロボットを用いたデジタルラボラトリの開発

### (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