

未踏探索空間における革新的物質の開発
2021 年度採択研究代表者

2021 年度 年次報告書

山田 淳夫

東京大学 大学院工学系研究科
教授

水を基軸とする未踏蓄電機能材料の開拓

§ 1. 研究成果の概要

金属亜鉛は、理論容量が 5854 mAh cm^{-3} と高いだけでなく、資源量に問題がなく、また水溶液から電析できるなどの利点を持つ。このため高安全性と高エネルギー密度が両立する次世代水系二次電池の負極材料候補として注目されてきた。しかし、これまで金属亜鉛の利用効率(析出/溶解効率、クーロン効率)は実用化レベル($> 99.9\%$)に到達しておらず、高効率化のための電解液開発が課題であった。弱酸性系において亜鉛イオン(Zn^{2+})のケミカルポテンシャルを上昇させることで、亜鉛の電位を貴に大きくシフトさせることに成功した。これにより負極電位が電解液の電位窓の内側(電解液が分解しない電位範囲)に入ったため、亜鉛負極の安定的作動による大幅な効率向上を実現し、1000 サイクル平均 99.95%以上という驚異的な可逆性を達成した。

レアメタルの Li に変わり、資源量の豊富な K をベースにした水系 K イオン電池は、元素戦略に基づくコスト競争力の点で魅力的である。機械学習(バイズ最適化)の導入による効率的 3 元系共晶組成の探索を通じて、従来の水系アルカリ電解液の濃度を遥かに上回る超高塩濃度(132 mol kg^{-1})の K 系ハイドレートメルトの開発に成功した。超高塩濃度化によって水分子間の水素結合が切断された結果、Lewis 酸性の弱い K 系においても、電解液中の水分子の活量が低下し、電位窓が約 4 V へと大幅に拡大した。これにより、水分子をも排除した「アルカリ金属カチオンとアニオンのみからなる室温イオン液体とその機能開拓」という、未踏材料分野創製が視野に入ってきた。

熔融水和物電解液の広い電位窓を活かす正極活物質として、 300 mAh/g 以上の高容量を発生する酸素レドックス電極に着目した。酸素発生反応との競合の下、安定な酸素レドックス反応を熔融水和物電解液中で作動させるためには、酸素レドックス反応を安定化する遷移金属イオン選択と、酸素発生反応を抑制する遷移金属イオン選択を、同時に行う必要があることが判った。

§ 2. 研究実施体制

(1) 山田グループ

- ① 研究代表者: 山田 淳夫
(東京大学大学院工学系研究科 教授)
- ② 研究項目
 - ・研究全体の総括及びイオン導電性溶融水和物の開発
 - ・界面現象の最先端計算法による理解と最適化

(2) 駒場グループ

- ① 主たる共同研究者: 駒場 慎一
(東京理科大学理学部第一部 教授)
- ② 研究項目
 - ・多元素電極材料の開発

(3) 藪内グループ

- ① 主たる共同研究者: 藪内 直明
(横浜国立大学大学院工学研究院 教授)
- ② 研究項目
 - ・界面・欠陥の能動的制御を利用した新材料開発

(4) 中山グループ

- ① 主たる共同研究者: 中山 将伸
(名古屋工業大学大学院工学研究科 教授)
- ② 研究項目
 - ・機械学習による重要因子分析とデータ可視化
 - ・材料シミュレーションによる材料探索・解析
 - ・データ科学に基づく材料探索・解析・技術移転

(5) 大久保グループ

- ① 主たる共同研究者: 大久保 将史
(早稲田大学先進理工学部 教授)
- ② 研究項目
 - ・先端的放射光分光による電子状態の解析

【代表的な原著論文情報】

- 1) “Superconcentrated NaFSA-KFSA Aqueous Electrolytes for 2 V-Class Dual-Ion Batteries”, T. Hosaka *et al.*, ACS Appl. Mater. Interfaces, vol. 14, No. 20, pp.23507–23517, 2022.

2) “Oxygen redox versus oxygen evolution in aqueous electrolytes: critical influence of transition metals”, H. Umeno, et al., M. Okubo, A. Yamada, *Adv. Sci.* vol. 9, No. 12, pp.2104907, 2022.