

原子・分子の自在配列・配向技術と分子システム機能
2021 年度採択研究代表者

2022 年度
年次報告書

是津 信行

信州大学 学術研究院
教授

固液電気化学相界面の多階層構造制御

主たる共同研究者:

古山 通久 (信州大学 先鋭領域融合研究群 教授)

長尾 祐樹 (北陸先端科学技術大学院大学 先端科学技術研究科 教授)

研究成果の概要

リチウムイオン電池およびナトリウムイオン電池の正極材料において、充電深度の深い脱リチウム(ナトリウム)組成における不可逆的相転移の抑制や異相界面の安定化、電解液の吸着構造の制御など、相関イオン拡散ダイナミクスの自在制御に及ぼす準安定相界面の活用や動的な連続媒体の活用によってもたらされる効果を明らかにした。ハイエントロピー材料や複合アニオン化材料が世界中で開発されるなか、蓄電材料におけるこれらの効果を明確に示すことができた。さらに、固体表面に塗布した高分子固体電解質超薄膜において、バルクとは異なるナノ構造の形成を見出した。膜厚増加とともに膜密度が連続的に変化したことから、リオトロピック液晶性発現により、固体表面からバルク領域における階層構造が形成されることがわかった。さらに、炭素電極上のイオン伝導性高分子薄膜の面内イオン伝導度を決定する世界オンリーワンの手法を開発した。その他、無歪み系層状正極材料の候補の提案や、高分子固体電解質超薄膜において、実験では見極めが困難であった面内方向のイオンチャンネルの形成など、UNNP を使った計算では、従来の DFT 計算方法では困難であった多元素系材料や高分子材料の組み合わせや配置の数まで考慮した解析が可能になった。中期目標達成に向けた目途がついた。

2021-2022 年度にかけて開発した電極活物質および固体電解質材料は、現行のリチウムイオン電池やナトリウムイオン電池の限界性能を突破し、高エネルギー密度と入出力密度、さらに長期信頼性を共立するキラーマテリアルになる可能性がある。一部の電極活物質は、信州大学発ベンチャーにライセンスし、2023 年から研究用試薬としての販売を開始した。また、国内電池メーカーとの共同研究契約を締結し、中型リチウム(ナトリウム)イオン電池に搭載する正極活物質としての開発に着手した。

【代表的な原著論文情報】

- 1) D. Kim, H. Shiiba, K. Teshima, and N. Zettsu: "Li⁺ Storage and Transport in High-Voltage Spinel-Type LiNi_{0.5}Mn_{1.5}O₄ Codoped with F⁻ and Cu²⁺" *Journal of Materials Chemistry A*, 2023,11, 838-848.
- 2) Y. Yao, H. Watanabe, M. Hara, S. Nagano, and Y. Nagao: "Lyotropic Liquid Crystalline Property and Organized Structure in High Proton-Conductive Sulfonated Semialicyclic Oligoimide Thin Films" *ACS Omega*, 2023, 8, 7470-7478.
- 3) K. Hisama, G. V. Huerta, M. Koyama: "Molecular dynamics of electric-field driven ionic systems using a universal neural-network potential" *Computational Materials Science*, 2023, 5, 111955.