

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

2022 年度
年次報告書

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 (物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点 副拠点長)
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。2022 年度は以下の成果を得た。

1. 高いイオン伝導性(室温で $1.1 \times 10^{-4} \text{ Scm}^{-1}$ 、輸率 0.95 以上)を示す分子結晶 $\text{Li}\{\text{N}(\text{SO}_2\text{F})_2\}\{\text{NCCH}_2\text{CH}_2\text{CN}\}_2$ について、5 V 級正極材料と組み合わせた全固体薄膜電池を動作させることに成功した。電気化学特性や試料断面観察から、安定な界面層の形成を見出した。この結果は、バルク型分子結晶全固体電池の高電位動作に向けて、界面制御に関する有用な知見である。
2. 分子結晶とフィラーを複合化することにより、 $1 \times 10^{-3} \text{ Scm}^{-1}$ を超える伝導性を示すナノコンポジット電解質が得られることを明らかにした。これは、分子結晶とフィラーの界面で高イオン伝導性が発現することを示唆する。
3. 分子結晶とフィラーの均一混合を目的としたプロセスの自動化を検討し、上記の $1 \times 10^{-3} \text{ Scm}^{-1}$ を超える伝導性を示すナノコンポジット電解質を、実験者の技量や経験に依らず再現性良く得る条件を見出した。
4. 分子結晶固体電解質の物質設計に向けて、イオン相関を考慮した非平衡分子動力学(MD)計算手法を開発した。従来用いられてきた多くの MD 計算はイオン相関が伝導度を与える影響を無視していた。開発した非平衡 MD 計算は、従来法に比べて高精度かつ高速であることから、本手法を用いることで分子結晶中のイオン伝導機構の解明や新物質設計指針が得られると期待される。