

【基盤研究(S)】

大区分E



研究課題名 孤立分子・孤立軌道の特異性に基づく蓄電材料機能の革新

東京大学・大学院工学系研究科・教授

やまだ あつお
山田 淳夫

研究課題番号： 20H05673 研究者番号：30359690

キーワード： 孤立軌道、孤立分子、蓄電池、電気化学反応、分子動力学計算

【研究の背景・目的】

人類が目指すべき低炭素社会、エネルギー自給自足社会に向けて、再生可能エネルギーの分散利用とその制御技術の重要性が高まっています。本質的に制御不能な再生可能一次エネルギーを電力に変換した上で、需給バランスを最適化し有効利用するために蓄電機能は不可欠です。将来的に建物や住宅レベルでのエネルギー自給自足が確立される際には、蓄電池が移動体用電源としてのみならず、電力需給システムの中核を担う社会インフラとしても広く浸透していくこととなります。

通常、液体や固体の性質はこれらを構成する分子間・電子間の相互作用によって発現します。最近の研究で、周囲との相互作用から隔離された分子や電子を大量に導入することが可能で、これらが非常に特異な性質を示すことや、場合によっては電気を蓄える機能を大幅に改善することが明らかになりました。

本研究では、この新しい現象に着目し、孤立した分子や電子の性質を積極的に制御・活用することで新材料を開発し、蓄電デバイスの飛躍的機能向上を目指します。仕組みの解明には分子や電子の状態を正確にシミュレーションする最先端技術を適用し、材料開発に活かします。

【研究の方法】

エネルギー貯蔵変換に関わる有機電解液、アーク電解液、固体電極材料、及び固液界面において超機能を実現します。具体的には、(1) 電解液中における水分子・有機溶媒分子の孤立化に伴うフロンティア軌道準位の変調を利用した電位窓の拡張、(2) 固体電極中における電子軌道の孤立化に伴う反応電位変調及び電荷貯蔵限界突破を利用した高電圧化・高容量化、(3) 電極/電解液界面の電気二重層における孤立分子生成に伴う誘電率の変調を利用した高密度電荷貯蔵の可能性を追究します。

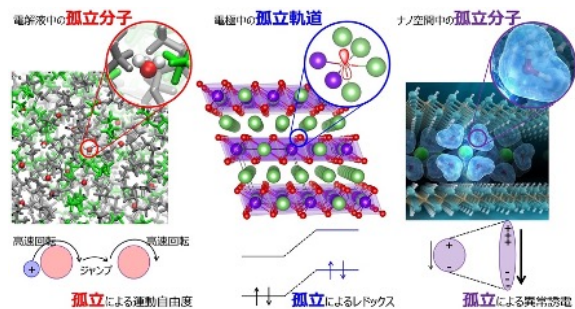


図1 導入される孤立分子・孤立軌道の概念図

【期待される成果と意義】

本研究の最大の特徴は、孤立分子・孤立軌道の大量導入が、溶液濃度制御、合成出発組成といった、きわめて一般的かつ簡便な手法で行われるにもかかわらず、大きく変調されるのが原子や分子の配列構造、ひいては電子状態といった材料物性の本質に関わる部分であるため、物質の基本形態を維持したまま、機能発現が改良レベルをはるかに超えて大きな不連続性を伴う(図2)ことです。すなわち、根底に実現可能性、応用展開性、社会実装性が確固とした前提として存在しつつも、ブレークスルー達成可能性の高い研究戦略であると考えています。

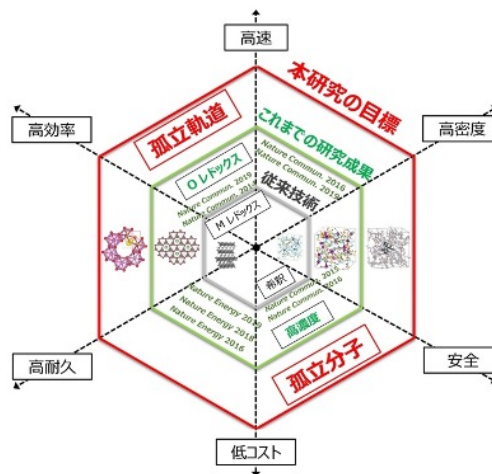


図2 オリジナリティの階層とインパクト。赤線は本研究が追求する機能フロンティア

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・ Q. Zheng, Y. Yamada, R. Shang, E. Nakamura, A. Yamada, A cyclic phosphate-based battery electrolyte for high-voltage and safe operation, *Nature Energy*, 5, 291-298 (2020)
- ・ T. Sudayama, D. Asakura, X. Shi, B. M. Boisse, E. Watanabe, Y. Harada, M. Nakayama, M. Okubo, A. Yamada, Multibond orbital formation for stable oxygen redox reaction in battery electrodes, *Energy Environ. Sci.*, 13, 1492-1500 (2020)

【研究期間と研究経費】

令和2年度～6年度 151,100千円

【ホームページ等】

<http://www.yamada-lab.t.u-tokyo.ac.jp/>