

科学研究費助成事業（特別推進研究）公表用資料
〔平成30年度研究進捗評価用〕

平成27年度採択分

平成30年5月31日現在

研究課題名（和文） **新材料・新界面統合設計戦略に基づく革新的エネルギー貯蔵システムの構築**

研究課題名（英文） **Development of advance energy storage System based on overall strategies on new materials and new interface**

課題番号：15H05701

研究代表者

山田 淳夫 (YAMADA ATSUO)

東京大学・大学院工学系研究科・教授



研究の概要：2次電池を構成する機能材料・機能界面の新規発想に基づく集中的多様化と、機能発現における基本学理の包括化と深化、体系化を行う。確立された学理を拠り所とした対象の俯瞰による機能相界面の能動制御やデバイスシステムとしての最適化を行い、将来型高機能2次電池に向けた現実的方向性を提示する。

研究分野：化学

キーワード：電池、新材料、新界面

1. 研究開始当初の背景

(1) 持続可能、永続可能社会への移行の緊急性に対する問題意識は広く社会に浸透しており、その実現に不可欠な次世代のエネルギー貯蔵変換デバイスの開発が強く望まれている。特に、自動車用途や電力貯蔵用途を中心とした高機能大型2次電池への期待は極めて大きい。

(2) 現状の2次電池技術においては、機能電極材料の選択肢が数種類に限定されており、これらに適合する機能電解液材料の選択肢はさらに限定され、ほぼ1種類が25年以上に渡って固定して使用され続けている。

2. 研究の目的

新規発想に基づき、電極・電解液機能材料群及びこれらとの形成される機能界面の多様性を実態ベースで一気に拡大した上で、俯瞰的・システマ的思考を融合してデバイスとしての全体最適化を行い、次世代2次電池の現実解を提示する。

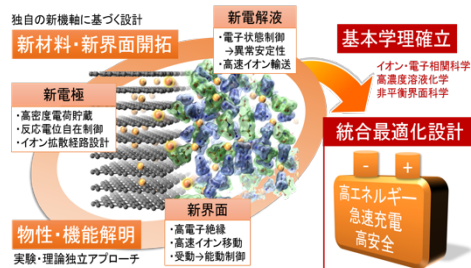


図1 研究の全体像

3. 研究の方法

具体的検討事項は大きく(a)新規インターカレーションホスト材料探索、(b)新規イオン吸着ホスト材料探索、(c)新基軸に基づく電解液材料探索、(d)相界面形成機構解析及び能動制御手法確立、(e)新規高機能エネルギー貯蔵システム創製、の五つに添った形で明確に整理・集約する。あくまでも新基軸に基づく新規機能材料と新規機能相界面に対する視点を中心に置き、材料の組み合わせにより劇的に変化する電気化学特性とを体系的に関連づけることにより、材料探索、現象の理解の深化、界面の能動的制御、新奇デバイス構築による応用展開をシームレスに行う。

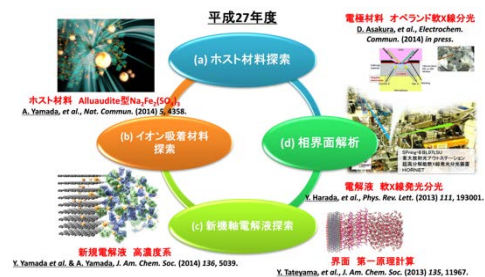


図2 具体的方法論

4. これまでの成果

(1) Hydrate melt 型水溶液が4Vを超える極めて広い電位窓を有し、現用のリチウムイオン電池と同等以上の性能を実現できる見通しを得た。全ての水分子がリチウムイオンに対して配位状態となっている特殊構造が機能の

起源であることを確認した。現状のリチウムイオン電池の高性能化を大幅な低コスト化と同時に実現するばかりでなく、生産工程から投資・維持費とも極めて高額なドライルームが撤廃される可能性を提示する画期的結果である。

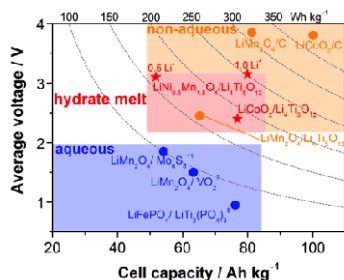


図3 ハイドレートメルトが創成する新電池技術領域

(2) 二次電池用正極活性物質の充放電容量を増大させる孤立酸素 $2p$ 軌道を遷移金属酸化物中に効率的に導入する手法として、遷移金属欠陥を層状酸化物に生成することが有効であることを見出した。遷移金属欠陥は可動カチオンと3次元クーロン引力ネットワークを形成し、充電状態の構造を安定化する機能性も併せ持つことから、今後の材料設計におけるトレンドになり得る。

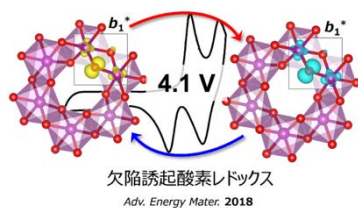


図4 欠陥が同時誘起する過剰容量と相安定性

(3) 層状化合物の層間にイオンと水分子が閉じ込められた場合、水分子が電場を過剰遮蔽、すなわち負の誘電率を持ち、大きな静電容量を持つキャパシタ電極を実現できることを発見した。双極子分極が外部電場と共鳴して増幅されることが分かり、ルイス酸性の強いカチオンがこの共鳴効果を発現しやすいことが示された。水和圏を連続体として扱う Stern モデルを大幅に改良する必要があることを提示する学術的にも重要な成果である

5. 今後の計画

軟 X 線吸収・発光分光や第一原理分子動力学計算によるフロンティア電子軌道準位の評価、さらには酸化・還元時の分解反応経路の特定を行うことで、発見した様々な新規電気化学機能やその阻害因子の本質的起源を解明する。得られた知見をもとに、更なる高機能材料の設計・開発を行い、これらを最適に融合した将来型高機能二次電池に向けての、現実的方向性を提示する。

6. これまでの発表論文等 (受賞等も含む)

J. Wang, Y. Yamada, K. Sodeyama, E. Watanabe, K. Takada, Y. Tateyama, A. Yamada, Fire-extinguishing organic electrolytes for safe batteries, *Nature Energy*, 3, 22–29 (2018)

Y. Yamada, K. Usui, K. Sodeyama, S. Ko, Y. Tateyama, A. Yamada, Hydrate-melt electrolytes for high-energy-density aqueous batteries, *Nature Energy*, 1, 16129 (2016)

J. Wang, Y. Yamada, K. Sodeyama, C. Chiang, Y. Tateyama, A. Yamada, Superconcentrated electrolytes for a high-voltage lithium-ion battery, *Nature Comm.*, 7, 12032 (2016)

B. Boisse, G. Liu, J. Ma, S. Nishimura, S. Chung, H. Kiuchi, Y. Harada, J. Kikkawa, Y. Kobayashi, M. Okubo, A. Yamada, Intermediate honeycomb ordering to trigger oxygen redox chemistry in layered battery electrode, *Nature Comm.*, 7, 11397 (2016)

B. Boisse, S. Nishimura, E. Watanabe, L. Lander, A. Tsuchimoto, J. Kikkawa, E. Kobayashi, D. Asakura, M. Okubo, A. Yamada, Highly Reversible Oxygen-Redox Chemistry at 4.1 V in $\text{Na}_{4/7-x}[\square_{1/7}\text{Mn}_{6/7}]\text{O}_2$ (\square : Mn Vacancy), *Adv. Energy Mater.*, DOI:10.1002/aenm.201800409, (2018)

山田淳夫

国際電池協会研究賞(2016)
米国セラミックス学会パーディ賞(2016)
電気化学会学術賞(2016)

大久保将史

文部科学大臣若手科学者賞(2017)
錯体化学会研究奨励賞(2017)

山田裕貴

新化学技術研究奨励賞(2015)
電池技術委員会賞(2017)
新化学技術研究 GSC 賞(2017)
電気化学会佐野賞(2017)

館山佳尚、袖山慶太郎

ドイツ・ゴットフリート・ワグネル賞(2015)
理化学研究所 Best Use of HPC in Manufacturing (2017)

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