

日本—中国 国際共同研究「環境/エネルギー分野」 2019 年度 年次報告書	
研究課題名（和文）	金属複合ナノ材料の界面構造制御によるアルカリ金属イオン二次電池の負極材料の研究開発
研究課題名（英文）	Development of Anode Materials of Alkali Ion Battery by Structure Control on the Interface of the Metal-Composite Nanomaterials
日本側研究代表者氏名	叶深
所属・役職	東北大学理学研究科化学専攻・教授
研究期間	2019 年 4 月 1 日 ～ 2022 年 3 月 31 日

1. 日本側の研究実施体制

氏名	所属機関・部局・役職	役割
叶深	東北大学大学院理学研究科化学専攻	総括と SFG 測定 of 解析
森田明弘	東北大学大学院理学研究科化学専攻	計算化学
井上賢一	東北大学大学院理学研究科化学専攻	SFG 測定の実施
王琳	東北大学大学院理学研究科化学専攻	モデル開発と SFG 計算の実施

2. 日本側研究チームの研究目標及び計画概要

本年度において、叶グループは金属複合ナノ材料の界面計測に合わせて計測システムの構築を行う。Li⁺のインターカレーションとデインターカレーションに伴い材料表面に形成される SEI 膜の界面構造観察を行う。SFG 観察条件の最適化を行い、SEI 膜の界面分子構造の解明を目指す。比較対象としてグラフェンと炭素材料の薄膜についても同様な評価

を行い、金属複合材料により界面 SEI 膜構造の違いについても検討する。また、森田グループはこれまでに開発してきた界面和周波分光の理論解析を二次電池の電極-電解質界面系に応用するように実装を拡張し、分子動力学シミュレーションの計算スキームとプログラムを固液界面を扱えるように拡張する。

3. 日本側研究チームの実施概要

コロナウイルス感染症の拡大で、年明け以降は中国側との共同研究がほぼ完全に遮断されたが、日本側研究チームは界面敏感な和周波発生(SFG)分光法を用い、リチウムイオン二次電池のアノード電極表面の評価を行い、電池の充放電に伴い、安定な固体電解質膜(SEI)の形成条件と反応機構について詳しく調べてきた。特に電解質溶液中に酸素分子が混入される際に、SEI 膜形成に大きく影響を与えることを見出した。酸素分子の電気化学的還元により発生される超酸化物イオンが溶媒分子の分解とポリマーゼーションを促進し、SEI 膜の膜厚や膜安定性の増強に寄与することを見出した。分子動力学シミュレーションを含めて、SEI 膜の形成機構の解明と安定性促進の方法樹立を目指す。