

ALCA-Next

「蓄エネルギー」領域

2023 年度 年次報告書

2023 年度採択

[上野和英]

[横浜国立大学大学院工学研究院 准教授]

[Li 塩のイオン液体化と革新的 Li 系二次電池への展開]

主たる共同研究者:

[篠田 渉 (岡山大学異分野基礎科学研究所 教授)]

[宇賀田 洋介 (横浜国立大学大学院工学研究院 助教)]

実施期間 : 2023 年 11 月 15 日 ~ 2024 年 3 月 31 日

## §1. 研究開発成果の概要

本研究では、微量高分子添加による Li 塩の超可塑性、深過冷却化技術の深化により、高いイオン伝導性と電気化学耐性、熱安定性、過冷却状態安定性を示すイオン液体電解質を開発し、これを電解質に用いることで安全性に優れ、高エネルギー、高出力密度を有する革新的蓄電池を実現することを目的としている。またこの際、イオン液体を予め導入した合材電極およびゲル電解質も開発し、従来の電池製造設備を活用した Roll-to-roll 方式による経済的電池製造プロセスに資する基盤技術を構築することも目的としている。

本年度は、微量高分子添加による Li 塩の超可塑性、深過冷却化現象の解明のため、実験的・計算科学的な検討の両面から、超可塑性・深過冷却化した Li 塩では添加高分子の配位サイトと Li イオンが強く相互作用していること、Li 塩-微量高分子混合系で異常な体積変化が起こっていることを明らかにした。MD シミュレーションにおいて、本系を効率的かつ再現よく計算するためのパラメータ・力場の最適化を行い、ダイナミクスを検討した結果、添加高分子は結晶化を妨げるのに主要な役割を果たすことに加え、本系のイオンダイナミクスの制御には Li 塩のアニオンのデザインがより重要であるという見解が得られた。また、多種 Li 塩および添加高分子の混合比とイオン伝導性、過冷却液体寿命の関係性を調査したところ、イオン伝導性増加が期待できる系では過冷却安定性が低いというトレードオフが観測され、イオン伝導性と過冷却液体状態の安定化の両立のために今後必要な材料選択、設計指針を得た。加えて、高粘性の超可塑性・深過冷却化した Li 塩に適したセパレーター材料を探索し、濡れ性の問題を解決した。これを電解質とした電池性能試験によって、実電池レベルに近い比較的大きな面積容量においても充放電可能なことを確認した。

### 【代表的な原著論文情報】

- 1) “Molecular level origin of ion dynamics in highly concentrated electrolytes” K. Shigenobu, S. Tsuzuki, F. Philippi, T. Sudoh, Y. Ugata, K. Dokko, M. Watanabe, K. Ueno, W. Shinoda, *The Journal of Physical Chemistry B*, 127, 10422-10433, 2024.
- 2) “Linear ether-based highly concentrated electrolytes for Li-sulfur batteries” T. Ishikawa, S. Haga, K. Shigenobu, T. Sudoh, S. Tsuzuki, W. Shinoda, K. Dokko, M. Watanabe, K. Ueno, *Faraday Discussion*, 2024. DOI: 10.1039/D4FD00024B