

日本—中国 国際共同研究「環境・エネルギー分野」 2020 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

今年度において、叶グループはこれまでに開発してきた計測システムをフルに活用し、 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炭素アノード極に表面構造変化について調べた。特に一回目の Li^+ のインターカレーション（充電）において、電池の安定性を決定する固体電解質膜（SEI 膜）の構造と安定性について詳しく評価する。グラフェンなどの炭素材料のほかに、金属複合アノード材料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

今年度において、研究ワークパッケージ 1 は、リチウムイオン電池の安定作動に極めて重要である固体電解質膜(SEI)の和周波発生(SFG)分光法やラマン分光のその場測定による構造評価について取り組んできた。炭素材料の基本モデル材料として化学蒸着法により作製されたグラフェン単結晶アノード極表面において、リチウムイオン電池の充放電に伴い SEI 膜の形成過程と構造変化について追跡した。溶液中に溶存する少量の酸素分子は超酸化物ラジカルイオンを形成するため、SEI 膜の膜厚と安定性に大きく影響を及ぼし、SEI 膜の形成を促進していることが初めて分かった。

また、研究ワークパッケージ 2 では、SEI 形成に重要である有機カーボネート溶媒の C=O バンドは複素屈折率における大きな分散をもたらす、和周波分光のスペクトル形状に大きな影響を与える可能性がある。本年度には、強い吸収をもつ振動バンドについて見積もる理論を確立した。研究ワークパッケージ 1 の和周波分光測定条件と解析に重要な指針を与える。SEI 膜の形成に伴い観測された和周波発生スペクトルを定量的に解析するために、新しいリトン計算のスキームの構築を行った。