

# 二次電池開発の現状と到達点

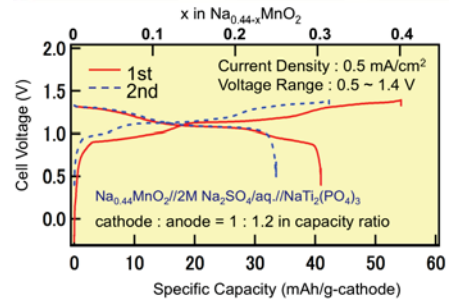
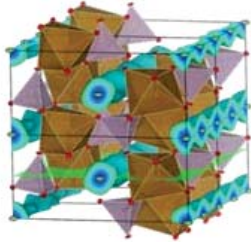
7/36

1991年~日本優位の時代  
リチウムイオン電池の誕生

リチウムイオン電池概念  
の限界(資源・性能)

新概念: 部分混合高速充放電モデル提唱

山田ら, *Nature Mater.* (2006).



現象説明: イオンの動きを可視化

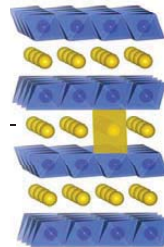
山田ら, *Nature Mater.* (2008).

正極新材料  $\text{Li}_2\text{FeP}_2\text{O}_7$  の発見

山田ら, *JACS* (2010).

水系Naイオン電池の開発

岡田ら, *JECS*(2011).



FeMn酸化物を正極とした  
Na電池開発  
世界最大容量

駒場ら, *Nature Mater.* (2012).

# 二次電池開発の現状と到達点

8/36

1991年~日本優位の時代  
リチウムイオン電池(LIB)の誕生

LIB概念の限界  
(資源・性能)

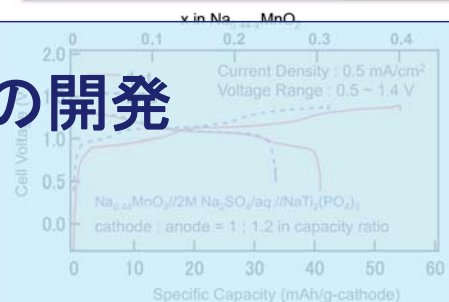
新概念: 部分混合高速充放電モデル提唱

## 次世代二次電池の開発

山田ら, *Nature Mater.* (2006).



Na電池  
Mg電池  
空気電池



水系Naイオン電池の充放電

岡田ら, *JECS*(2011).

現象説明: イオンの動きを可視化

山田ら, *Nature Mater.* (2008).

理論に基づいた高性能二次電池の開発  
中国、韓国などの追従を許さない、研究組織の確立

正極新材料  $\text{Li}_2\text{FeP}_2\text{O}_7$  の発見

山田ら, *JACS* (2010).

駒場ら, *Nature Mater.* (2012).

量子化学、フロンティア軌道理論などによる反応機構の解明と予測

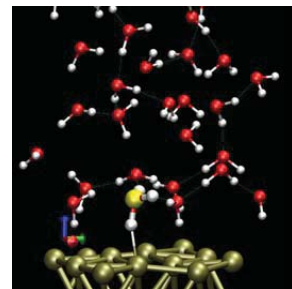
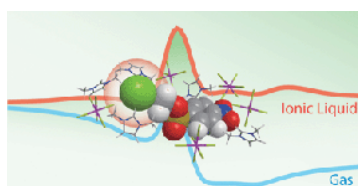
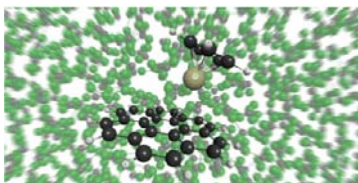
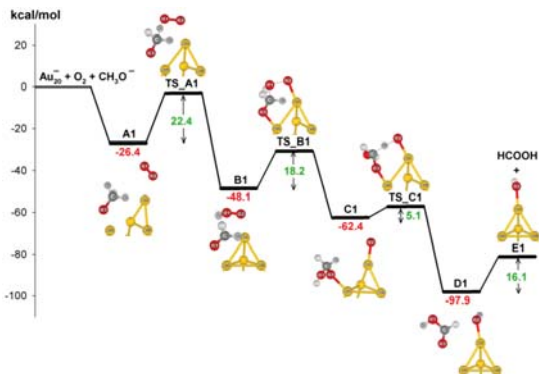
MDや積分方程式理論による溶媒和構造と自由エネルギー評価

特に、触媒や電池の化学では、分子の反応過程、固体や表面の複雑な構造、電子状態の理解と予測が不可欠

DFT(第一原理計算)

量子化学と統計力学

第一原理計算  
ESM(電場効果)考慮



Au微粒子触媒反応の理論計算  
構造のflexibilityが重要  
江原ら, PCCP (2010)

溶液内反応やイオン液体  
での溶媒和の解明  
佐藤ら, PCCP (2010)

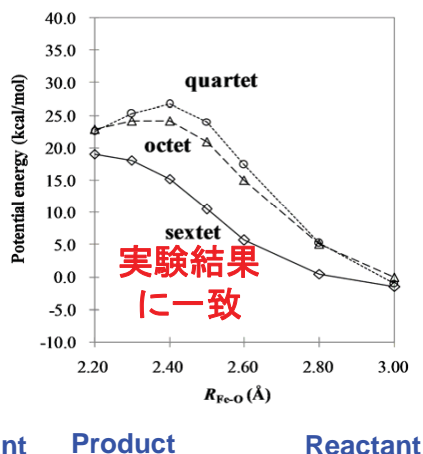
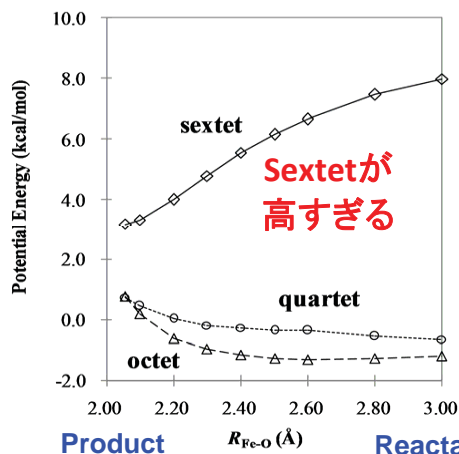
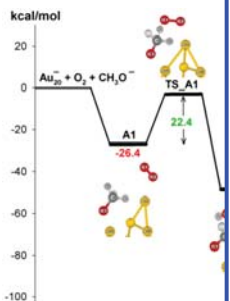
白金電極反応の理論計算  
電場下での電極反応  
の微視的理解に成功  
森川ら, 大谷ら, JCP(2011)

特に、触媒や

DFT(第一原理計算)

DFT(第一原理計算)

波動関数理論



Fe(III)錯体とO<sub>2</sub>の反応

DFTでは誤った結果。波動関数理論が必要。

佐藤ら, J. Phys. Chem. B (2009)

Au微粒子

構造のflexibilityが重要  
江原ら, PCCP (2010)

での溶媒和の解明  
佐藤ら, PCCP (2010)

の微視的理解に成功  
森川ら, 大谷ら, JCP(2011)

触媒反応、溶液内反応、電極反応過程の微視的理解が可能、しかし、方法論の開発も必要

# 実験と理論計算科学のインタープレイによる 触媒・電池の元素戦略研究拠点

3  
L

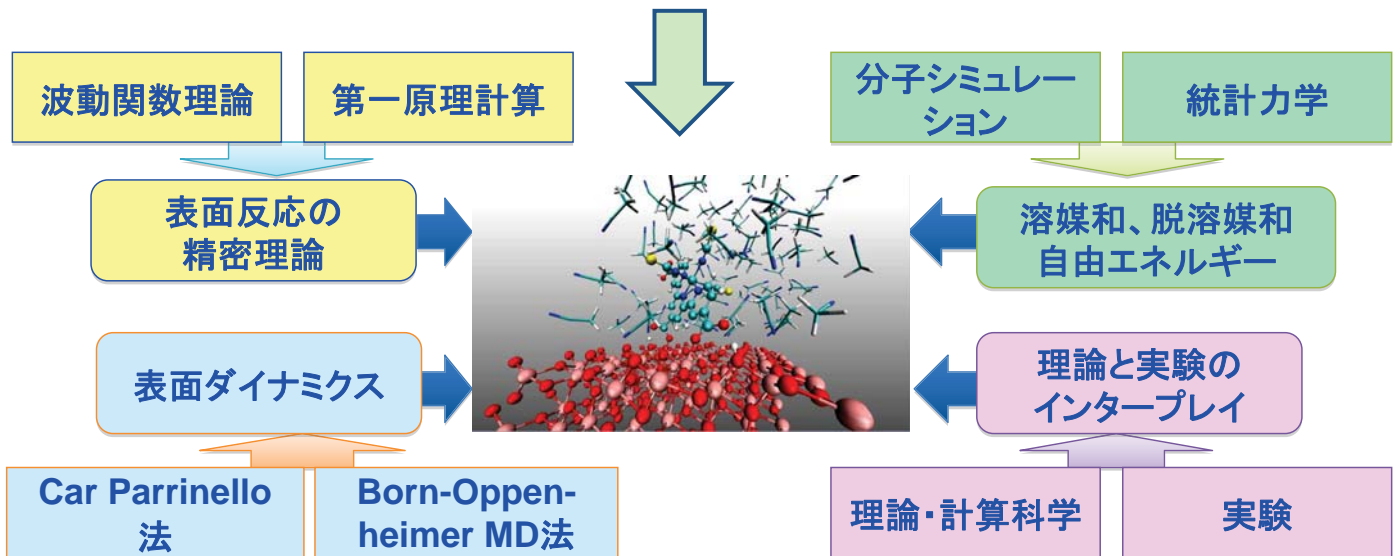
研究計画

我々の達成目標

- ◆希少元素フリーの高性能触媒
- ◆希少元素フリーの高性能二次電池
- ◆物質科学の原理解明と予測

## 触媒・電池(複雑・複合系)のための理論・計算科学

化学と物理の統合、量子化学、統計力学の融合が必要  
それをどう実現するか？

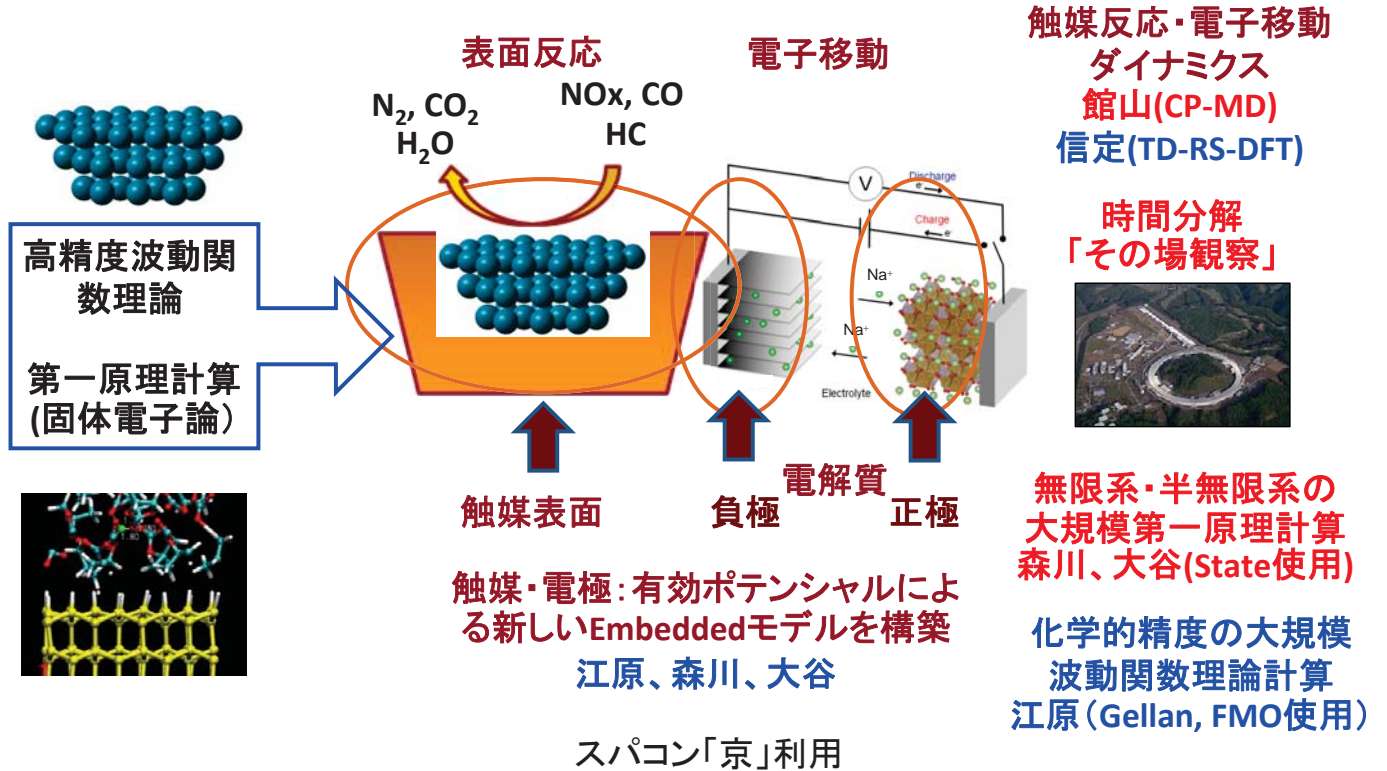


複雑な複合系の電子状態、構造変化、反応ダイナミクス、自由エネルギーを求める方法論の開発

# 我々の理論計算科学の具体像: 触媒・電極研究

13/36

化学的精度を持った固体、表面化学事象の理論計算科学法の開発  
(高精度DFTと波動関数理論の計算プログラム、固体表面モデルの構築)

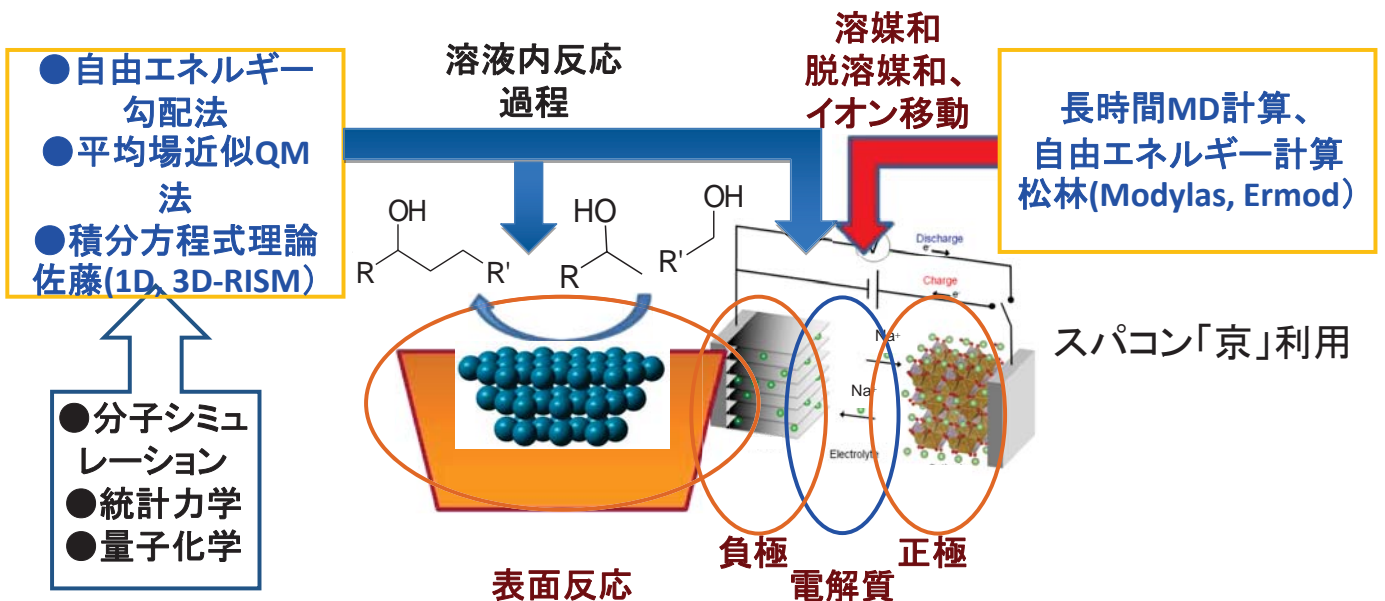


# 我々の理論計算科学の具体像: 電解質、溶液内反応研究

14/36

理想溶液とは異なる濃厚溶液での

溶媒和、脱溶媒和、イオン移動の微視的理解と予測  
 溶媒構造のゆらぎを考慮した反応(QM計算)の微視的理解と予測



平均場近似QM法: 古典論によるMD計算の多数のスナップショットから平均場を構し、その平均場の中で量子化学(QM)計算を行う新しい方法