

固液界面におけるエネルギー変換
Energy conversion at the interface between solid and liquid

京都大学 産官学連携本部 湊 丈俊

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、電気化学、触媒、電子デバイス、生化学などで反応場となる、固体と液体の界面(固液界面)におけるエネルギー変換現象の機構を原子・分子レベルで解明するために、構造、物性などを第一原理計算及び分子動力学計算によって研究した。

我々は、既存の二次電池のエネルギー密度を超える新しい二次電池として、「フッ化物シャトル二次電池」[1-4]の開発を進めている。二次電池において、電極と電解液の界面(電極電解液界面)の物性や反応は電池性能に大きな影響を与える[5]が、埋もれた界面であることから解析手法が限られ、その議論は想像に頼っている場合が多い。我々は、電極電解液界面における反応を制御することで、フッ化物シャトル電池の電極反応の反応性を向上させることに成功した[2-3]が、その反応機構は不明な点が多く残っていた。そこで、反応機構を解明するために、電解液中の分子構造を第一原理計算で解析し、キャリアイオンであるフッ化物イオンが添加物と配位結合を作り、支持塩の溶解度やイオン伝導性を高めていることを明らかにした[3, 4]。

また、水溶液中で固液界面に生成する水和構造は、様々な物理、化学、生物学的なエネルギー変換現象に著しい効果を与えるが、その原子・分子レベルでの描像も想像に頼っている部分が多い。我々は、液中で動作する周波数変調原子間力顕微鏡[5]による観測と分子動力学計算を用いて、水和構造における固体表面の次元性の効果[6]と、粘度分布における局所構造の効果[7]の解明を原子レベルで達成することに成功した。

文献

- [1] Hiroaki Konishi, Taketoshi Minato, Takeshi Abe, and Zempachi Ogumi, Electrochemical Performance of a Bismuth Fluoride Electrode in a Reserve-type Fluoride Shuttle Battery, *Journal of The Electrochemical Society*, **164**, A3702-A3708 (2017). (謝辞あり)
- [2] Hiroaki Konishi, Taketoshi Minato, Takeshi Abe, and Zempachi Ogumi, Improvement of cycling performance in bismuth fluoride electrodes by controlling electrolyte composition in fluoride shuttle batteries, *Journal of Applied Electrochemistry*, **48**, 1205-1211 (2018).
- [3] Hiroaki Konishi, Taketoshi Minato, Takeshi Abe, Zempachi Ogumi, Electrochemical performance of a lead fluoride electrode mixed with carbon in an electrolyte containing triphenylboroxine as an anion acceptor for fluoride shuttle batteries, *Materials Chemistry and Physics*, **226**, 1-5 (2018). (謝辞あり)

- [4] Asuman Celik Kucuk, Taketoshi Minato, Toshiro Yamanaka, Takeshi Abe, *Journal of Materials Chemistry A*, *in press*. (謝辞あり)
- [5] Taketoshi Minato and Takeshi Abe, Surface and Interface Sciences of Li-ion Batteries, *Progress in Surface Science*, **92**, 240–280 (2017).
- [6] Kenichi Umeda, Kei Kobayashi, Taketoshi Minato, Hirofumi Yamada, Atomic-Scale 3D Local Hydration Structures Influenced by Water-Restricting Dimensions, *Langmuir*, **34**, 9114–9121 (2018). (謝辞あり)
- [7] Kenichi Umeda, Kei Kobayashi, Taketoshi Minato, Hirofumi Yamada, Atomic-level viscosity distribution in the hydration layer, *Physical Review Letters*, **122**, 116001 (2019). (謝辞あり)