

令和 4 年 5 月 28 日現在

機関番号：12701
研究種目：基盤研究(A) (一般)
研究期間：2018～2021
課題番号：18H03926
研究課題名(和文) 高速なアルカリ金属イオンホッピング伝導と高速電気化学反応を実現する電解液設計

研究課題名(英文) Liquid electrolyte formulation for rapid Li-ion hopping conduction and fast electrochemical reactions

研究代表者
獨古 薫 (DOKKO, Kaoru)
横浜国立大学・大学院工学研究院・教授

研究者番号：70438117
交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 33,500,000円

研究成果の概要(和文)：様々な溶媒にアルカリ金属塩を高濃度で溶解させた電解液を調製し、分光学的な方法で電解液中の溶媒構造を解析するとともに、電解液のイオン伝導機構や電気化学特性に関する研究を行った。その結果、スルホランなどのスルホン類やスクシノニトリルなどのジニトリル類を溶媒に用いた高濃度電解液中では、アルカリ金属イオンが配位子(溶媒およびアニオン)を動的に交換することで配位子よりも速く拡散するホッピング伝導機構が発現した。これらの電解液は高いアルカリ金属イオン輸率を示すことから、電池に適用した際に濃度分極が抑制され、比較的高い電流密度で充放電が可能であることが分かった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究をとおして、古典的な電解質溶液論では説明できない現象である超濃厚電解液中におけるイオンホッピング伝導に関する知見が蓄積され、新たなイオン伝導機構の理論を確立する端緒になると考えられる。また、社会的にも重要な役割を果たす蓄電池を高出力化する上で、高速にイオン輸送が可能で、電極/電解液界面における電気化学反応抵抗が小さい電解液を開発することは重要であるが、本研究で得られた知見は、蓄電池の高出力化に向けて新たな電解液の設計指針を提示するものである。

研究成果の概要(英文)：Highly concentrated electrolytes containing alkali metal salts were prepared, and the coordination structure of alkali metal ions was analyzed by spectroscopic methods. Transport properties and electrochemistry of the highly concentrated electrolytes (HCEs) were investigated. In the HCEs with certain solvents such as sulfones and dinitriles, alkali metal ions exchanged the ligands (solvent and anion) dynamically and diffused more rapidly than the ligands, i. e., hopping conduction of alkali metal ion emerged in the HCEs. The high transference numbers of alkali metal ions were effective in suppressing the concentration polarization and in achieving a relatively high-rate capability of alkali metal batteries.

研究分野：電気化学

キーワード：電解液 イオン伝導 電気化学 電池

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

持続可能社会の実現に向けて蓄電池の果たす役割はますます重要となっており、蓄電池材料の研究開発が世界的に活発に行われている。リチウムイオン二次電池に代表される蓄電池の高エネルギー密度化や高出力化には電極材料に加えて電解液や固体電解質の研究開発も重要である。電解質(電解液)の役割は、電池の充放電時に正極と負極の間でイオンを輸送すると同時に、電池反応が起こる反応場(電極/電解質の界面)を提供するため、電解質の特性は電池内の物質輸送や反応速度に大きな影響を与え、急速充電・放電といった電池の入出力特性に直結する。

2. 研究の目的

これまで電解液の輸送特性に関しては、ワルデン則、ストークス則といった「イオン移動度は粘度に反比例する」という概念が広く受け入れられてきた。従来のリチウムイオン電池では、Li 塩を極性有機溶媒に溶解させた電解液が用いられているが、電解液中ではLewis酸性の強い Li イオンに溶媒が配位して溶媒和イオン ($[\text{Li}(\text{solvent})_x]^+$) となり、アニオンと解離する。イオン伝導率が最大となる 1 mol/L 程度の Li 塩濃度に調製された電解液が一般的に用いられている。しかし我々は、アルカリ金属塩を 3mol/L 程度含有する超濃厚電解液中で溶媒和されたアルカリ金属イオンが配位子(溶媒および対アニオン)を次々と交換してホッピング伝導するという、古典的な電解質溶液論では説明できない現象を世界に先駆けて発見した。本研究では、ホッピング伝導機構を実験と計算のインタープレーにより解明し、新たな学理を構築することを目的とする。また、高速なホッピング伝導を実現するための電解液の設計指針を確立し、超濃厚電解液/電極界面における Li イオンや Na イオンの電気化学的インターカレーション反応の高速化を実現する。さらに、これを蓄電池の電解液として適用することで、高出力な次世代蓄電デバイスを構築する。

3. 研究の方法

超濃厚電解液中におけるアルカリ金属イオンホッピング伝導にはアルカリ金属イオンへの溶媒およびアニオンの配位構造が大きな影響を及ぼす。本研究では、様々な溶媒にアルカリ金属塩を高濃度で溶解させた電解液を調製し、ラマン分光法により電解液中の溶媒和構造を解析した。溶液構造のダイナミクスは、イオン伝導率や粘度の測定、磁場勾配 NMR 法による液体中の溶媒とイオンの自己拡散係数評価により、塩の解離度や電荷輸送過程を解析するとともに、分子動力学(MD)シミュレーションにより、溶液構造のダイナミクスとホッピング伝導機構の解明を進めた。電解液中のホッピング伝導の発現および高速化には、塩濃度に加え、溶媒やアニオンの構造やサイズ、Lewis塩基性が重要なパラメータになると予測されたため、アルカリ金属塩のアニオン種と溶媒種を様々に変化させ、ホッピング伝導の発現要件を明らかにすることを試みた。さらに、リチウムイオン二次電池などで用いられる Li イオンの挿入・脱離が可能な遷移金属酸化物や炭素材料などの電極材料の超濃厚電解液中における電気化学反応について解析を行った。これにより、電解液中のアルカリ金属イオンの溶媒和構造とそのダイナミクスが界面電荷移動反応(Li イオンや Na イオンのインターカレーション反応)の反応速度に及ぼす影響について検討した。

4. 研究成果

(1) スルホランを溶媒に用いたアルカリ金属塩超濃厚電解液のイオン輸送特性

我々は環状スルホン系溶媒であるスルホラン(以下、SLと略す)を溶媒に用いて Li 塩を高濃度で溶解させた超濃厚電解液中において、Figure 1 の模式図に示すように、Li イオンが溶媒やアニオンよりも速く拡散する特異なイオン輸送現象を見出した。この超濃厚電解液中では、SL 分子およびアニオンが複数の Li イオンを架橋し、ネットワーク構造を形成しており、このネットワーク構造中で Li イオンが動的に配位子(溶媒およびアニオン)を交換するホッピング伝導機構が発現して、Li イオンが配位子よりも速く拡散し、高い Li イオン輸率を示す。本研究では、Li 塩や Na 塩を SL に高濃度で溶解させた超濃厚電解液を調製し、これらの電解液中におけるアルカリ金属イオンの輸送特性を詳細に解析した。

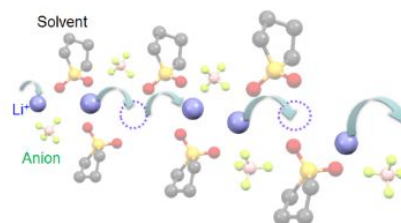


Figure 1. Schematic image of the Li ion hopping/exchange conduction in highly concentrated electrolytes of Li salt/SL.

Li 塩 / SL の超濃厚電解液のラマン分光測定を行ったところ Li 塩と SL のモル比が $[\text{Li 塩}]/[\text{SL}] \geq 1/3$ の場合には、系中のほぼ全ての SL が Li イオンに配位しており、フリーな SL はほとんど存在しないことが分かった。また、アニオンも Li イオンに配位していることが確認された。Na 塩の場合は、Na 塩と SL が 1:3 のモル比で融点が室温以上の溶媒和物を形成するが、 $[\text{Na 塩}]/[\text{SL}] = 1/1$ ではガラス形成性の液体となり、室温で安定に液体状態を維持した。ラマン分光測定を行ったところ、 $[\text{Na 塩}]/[\text{SL}] = 1/1$ の電解液では、系中の SL およびアニオンはいずれもほぼ全てが

Na イオンに配位していることが分かった。 $[\text{Na 塩}]/[\text{SL}] = 1/1$ の電解液について、MD シミュレーションを行った結果からも SL とアニオンがほぼ全て Na イオンに配位していることが示唆され、ラマン分光測定の結果と一致した。

次に、Li 塩と SL を様々なモル比で混合した電解液中の Li イオン輸率を直流分極法により評価したところ、電解液中の Li 塩のモル分率が高くなるほど Li イオン輸率が上昇することが分かり、 $[\text{LiBF}_4]/[\text{SL}] = 1/2$ の超濃厚電解液では、Li イオン輸率が 0.8 に達した。また、 $\text{NaN}(\text{SO}_2\text{F})_2$ と SL を 1:1 のモル比で混合した電解液の場合も同様に高い Na イオン輸率 (0.8) を示すことを確認した。このように、アルカリ金属塩を SL に高濃度で溶解させた電解液は高いアルカリ金属イオン輸率を示す傾向があった。

Li 塩 / SL の超濃厚電解液のイオン輸送特性をさらに解析するため NMR 測定を行った。磁場勾配 NMR 法により電解液中の溶媒とイオンの拡散係数の温度依存性を評価したところ、Li 塩 / SL の超濃厚電解液中では、Li イオンの拡散の活性化エネルギーが SL やアニオンと比較して小さくなることがわかった。また、NMR スピン格子緩和時間測定による配位子 (溶媒やアニオン) の回転相関時間の解析から、超濃厚電解液中では配位子 (溶媒およびアニオン) の速い回転運動によって Li イオンの配位子交換が促進され、Li イオンのホッピング伝導機構が発現することが示唆された。

(2) スルホン系溶媒の分子構造がリチウム塩超濃厚電解液の輸送特性に及ぼす影響

Figure 2 に示すスルホラン (SL) 以外のスルホン系溶媒 (3-メチルスルホラン (MSL), ジメチルスルホラン (DMS), エチルメチルスルホラン (EMS), エチルイソプロピルスルホラン (EiPS)) を溶媒に用いた Li 塩超濃厚電解液の輸送特性を解析し、溶媒の分子構造が Li イオンのホッピング伝導に及ぼす影響を調査した。

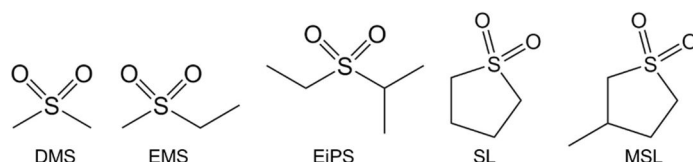


Figure 2. Chemical structure of sulfone solvents

LiBF_4 と DMS の混合物は融点が高く、どのような混合比でも室温で固体であった。 LiBF_4 /溶媒のモル比を 1/2 にした場合、イオン伝導度は $\text{SL} > \text{EMS} > \text{MSL} > \text{EiPS}$ という序列になることが分かった (Table 1)。分子サイズが大きい MSL や EiPS を溶媒に用いた場合は粘度が高くイオン伝導度は低くなった。SL 系と EMS 系では粘度が同程度であるにも関わらず、SL 系の方が高いイオン伝導率を示した。磁場勾配 NMR 法により電解液中の溶媒とイオンの拡散係数を測定したところ、SL 系の方が EMS 系よりも Li イオンの自己拡散係数が大きくなることが分かった。環状スルホン溶媒 (SL や MSL) を用いた電解液中の Li イオンと溶媒の自己拡散係数比 ($D_{\text{Li}}/D_{\text{sol}}$) および Li イオンと BF_4^- アニオンの自己拡散係数比 ($D_{\text{Li}}/D_{\text{BF}_4}$) は、非環状スルホン溶媒である EMS を溶媒に用いた電解液と比較して高かった。さらに、SL や MSL を溶媒に用いた電解液では、直流分極法により求めた Li イオンの輸率 (t_{Li^+}) も高くなり、Li イオンの配位子交換によるホッピング伝導が促進されることが明らかになった。これは、スルホニル基に結合している環状の炭化水素基のコンフォメーションは制限されるのに対し、EMS のエチル基は C-S 結合に沿った回転ができるため、エチル基の立体障害によって Li イオンの配位子交換が妨げられるためだと推察される。以上より、溶媒の分子構造が Li イオンのホッピング伝導過程に大きな影響を及ぼし、分子サイズが小さな環状構造を有するスルホン溶媒を用いることが電解液中の Li イオンホッピング伝導機構を発現させるうえでは有利であることが分かった。

Table 1. The concentration of LiBF_4 (c_{Li}), viscosity (η), ionic conductivity (σ), self-diffusion coefficient of Li^+ (D_{Li}), and Li-ion transference number (t_{Li^+}) of $[\text{LiBF}_4]/[\text{sulfone}] = 1/2$ electrolytes at 30 °C.

Solvent	c_{Li} mol dm ⁻³	η mPa s	σ mS cm ⁻¹	D_{Li} 10 ⁻⁷ cm ² s ⁻¹	t_{Li^+} -
SL	4.26	743	0.61	0.40	0.80
MSL	3.70	1033	0.23	0.20	0.80
EMS	4.37	755	0.42	0.23	0.70
EiPS	3.41	2358	0.05	0.05	0.68

(3) Li 塩と SL から成る超濃厚電解液中における電気化学反応の解析

SL を溶媒に用いた Li 塩超濃厚電解液中のアニオン種が電気化学的な Li 金属析出 / 溶解反応に及ぼす影響を調査した。 $[\text{LiN}(\text{SO}_2\text{CF}_3)_2]/[\text{SL}] = 1/2$ の電解液では、Li 金属の析出 / 溶解の平均クーロン効率が 80% 未満と低く、Li 金属の析出中に不可逆な電解液の還元分解が起きているこ

とが示唆された。一方, $[\text{LiN}(\text{SO}_2\text{F}_2)_2]/[\text{SL}] = 1/3$ の電解液では, 高いクーロン効率(=96%)で Li 金属の析出/溶解が可能であった。電解液の還元分解について調べるために電気化学質量分析法を用いて, Li 金属析出中に還元分解により発生するガスの分析を行った。その結果, $[\text{LiN}(\text{SO}_2\text{CF}_3)_2]/[\text{SL}] = 1/2$ の電解液中では Li 金属の析出反応中に Li 金属表面で SL 分子が還元分解し, SL の二つの酸素原子が取れたテトラヒドロチオフェンや SL の開環反応によってブタンが生成することが明らかになった。一方, $[\text{LiN}(\text{SO}_2\text{F}_2)_2]/[\text{SL}] = 1/3$ の電解液では Li 金属の析出反応中に SL の還元分解はわずかに進行するものの, ガス発生量は $[\text{LiN}(\text{SO}_2\text{CF}_3)_2]/[\text{SL}] = 1/2$ の電解液の場合と比較して大幅に少なく, SL の還元分解が抑制されることが分かった。 $[\text{LiN}(\text{SO}_2\text{F}_2)_2]/[\text{SL}] = 1/3$ の電解液中で析出させた Li 金属表面を X 線光電子分光法(XPS)により解析したところ, フッ化リチウム LiF が主成分の被膜が形成されていることが確認された。これは, Li 金属析出の初期にアニオン $\text{N}(\text{SO}_2\text{F}_2)_2^-$ が還元分解して Li 金属表面に LiF が析出し, 電子絶縁性の LiF を多く含む被膜が形成された後は SL の還元分解が抑制され, 被膜中を選択的に Li イオンが伝導して電気化学的な Li 金属の析出/溶解反応が起きるためと考えられる。以上の結果より, SL など Li 金属上で分解するスルホン溶媒を用いた超濃厚電解液の還元安定性向上には, Li 塩に $\text{LiN}(\text{SO}_2\text{F}_2)_2$ を用いることが有効であることが確認された。

次に, リチウムイオン二次電池の正極である LiCoO_2 電極の SL 系超濃厚電解液中における電気化学反応の解析を行った。SL 系超濃厚電解液中では高い Li 塩濃度により LiCoO_2 / 電解液界面における電荷移動抵抗が従来のリチウムイオン二次電池の電解液の場合と比較して小さくなることが分かった。また, 超濃厚電解液中では Li イオンに配位していないフリーな溶媒分子がほとんど存在しないため, LiCoO_2 / 電解液界面における溶媒の酸化分解の抑制やこれに伴う電荷移動抵抗の増大が抑制されることが分かった。

(4) Li 塩とジニトリルから成る超濃厚電解液の基礎物性及び電池適用

スルホン系溶媒と同様に 1 分子内に複数の配位サイトを有する溶媒の分子として, Figure 3 に示すジニトリル類(スクシニトリル(SN), グルタロニトリル(GN), アジポニトリル(ADN))に着目し, これらを溶媒に用いた Li 塩超濃厚電解液を調製し, 電解液中の Li イオンの配位構造や輸送特性を調査した。

$\text{LiN}(\text{SO}_2\text{F}_2)_2$ とジニトリル二元混合物二元混合物の熱測定を行って相図を作成したところ, $\text{LiN}(\text{SO}_2\text{F}_2)_2$ はいずれのジニトリルを用いた場合も 1:2 のモル比で安定な溶媒和物を形成することが分かった。この溶媒和物の結晶中では, ジニトリル分子の二つのシアノ基はそれぞれ異なる Li^+ イオンに配位し, Li^+ -ジニトリル- Li^+ の溶媒架橋型構造を形成する。 $[\text{LiN}(\text{SO}_2\text{F}_2)_2]/[\text{SN}] > 1/1$ のモル比では混合物はガラス形成液体になり, $[\text{LiN}(\text{SO}_2\text{F}_2)_2]/[\text{SN}] = 1/0.8$ は室温で液体状態となる。 $[\text{LiN}(\text{SO}_2\text{F}_2)_2]/[\text{SN}] = 1/0.8$ の液体中では, Li^+ -SN- Li^+ の溶媒架橋型構造と Li^+ - $\text{N}(\text{SO}_2\text{F}_2)_2^-$ - Li^+ のアニオン架橋構造が形成される。磁場勾配 NMR 法による自己拡散係数測定から, $[\text{LiN}(\text{SO}_2\text{F}_2)_2]/[\text{SN}] = 1/0.8$ の液体中では Li イオンは $\text{N}(\text{SO}_2\text{F}_2)_2^-$ や SN よりも速く拡散することが示唆され, これは Li^+ -SN- Li^+ のネットワーク構造中で Li イオンが配位子交換してホッピング伝導するためと考えられる。また, $[\text{LiN}(\text{SO}_2\text{F}_2)_2]/[\text{SN}] = 1/0.8$ は室温で非常に高い粘度(3142 mPa s)と低いイオン伝導度(0.26 mS cm^{-1})を示すにもかかわらず, Li イオンのホッピング伝導によって比較的高い拡散限界電流密度($\geq 7 \text{ mA cm}^{-2}$)が得られることがわかった。さらに, $[\text{LiN}(\text{SO}_2\text{F}_2)_2]/[\text{SN}] = 1/0.8$ は広い電位窓を有し, リチウムイオン二次電池のグラファイト負極や $\text{LiNi}_{1/3}\text{Mn}_{1/3}\text{Co}_{1/3}\text{O}_2$ 正極が安定に充放電を繰り返すことができることが分かった。

$\text{LiN}(\text{SO}_2\text{CF}_3)_2$ とジニトリル二元混合物の熱測定を行って相図を作成したところ, $\text{LiN}(\text{SO}_2\text{CF}_3)_2/\text{SN}$ および $\text{LiN}(\text{SO}_2\text{CF}_3)_2/\text{AND}$ では, 1:1.5 のモル比で安定な溶媒和物を形成することが分かった。しかし, $\text{LiN}(\text{SO}_2\text{CF}_3)_2/\text{GN}$ 混合物は $1/6 \leq [\text{LiN}(\text{SO}_2\text{CF}_3)_2]/[\text{GN}] \leq 1/1$ という広い組成範囲でガラス形成液体となり, 室温で液体状態となることを確認した。 $\text{LiN}(\text{SO}_2\text{CF}_3)_2/\text{GN}$ の電解液のラマン測定の結果から, $\text{LiN}(\text{SO}_2\text{CF}_3)_2$ の濃度上昇に伴って Li^+ -GN- Li^+ の溶媒架橋型のネットワーク構造が発達することがわかった。また, $\text{LiN}(\text{SO}_2\text{CF}_3)_2/\text{GN}$ の超濃厚電解液中では接触イオン対やイオン凝集体が多く形成される。このような電解液中では, Li イオンが配位子 (GN と $\text{N}(\text{SO}_2\text{CF}_3)_2^-$ アニオン) を交換して伝導するようになり, $\text{LiN}(\text{SO}_2\text{CF}_3)_2$ 濃度の上昇に伴って Li^+ の $\text{N}(\text{SO}_2\text{CF}_3)_2^-$ に対する自己拡散係数比は大きくなり, $[\text{LiN}(\text{SO}_2\text{CF}_3)_2]/[\text{GN}] = 1/1.5$ では Li イオン輸率が 0.74 と非常に高くなった。 $[\text{LiN}(\text{SO}_2\text{CF}_3)_2]/[\text{GN}] = 1/1.5$ をリチウム硫黄電池の電解液として適用したところ, イオン伝導度が 0.21 mS/cm と低いにもかかわらず, 高い Li イオン輸率によって濃度分極が抑制されたため, 2 mA/cm² 程度の比較的高い電流密度で放電することができた。

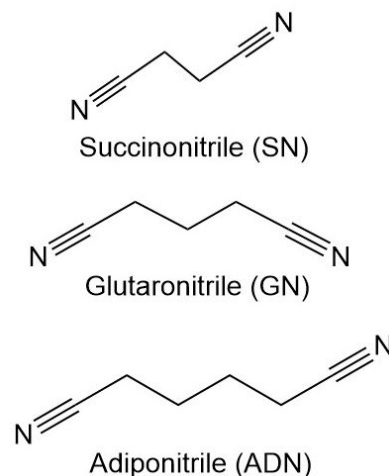


Figure 3. Chemical structures of LiFSA and nitrile solvents.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計26件（うち査読付論文 25件 / うち国際共著 4件 / うちオープンアクセス 8件）

1. 著者名 Tatara Ryoichi, Nishimura So, Okamoto Yukihiro, Ueno Kazuhide, Watanabe Masayoshi, Dokko Kaoru	4. 巻 124
2. 論文標題 Structures and Electrochemistry of γ -Butyrolactone Solvates of Na Salts	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 15800 ~ 15811
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.0c04161	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Tsuzuki Seiji, Nakamura Takenobu, Morishita Tetsuya, Shinoda Wataru, Seki Shiro, Umebayashi Yasuhiro, Ueno Kazuhide, Dokko Kaoru, Watanabe Masayoshi	4. 巻 3
2. 論文標題 Effects of Anion on Liquid Structures of Ionic Liquids at Graphene Electrode Interface Analyzed by Molecular Dynamics Simulations	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Batteries & Supercaps	6. 最初と最後の頁 658 ~ 667
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/batt.201900197	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Shigenobu Keisuke, Dokko Kaoru, Watanabe Masayoshi, Ueno Kazuhide	4. 巻 22
2. 論文標題 Solvent effects on Li ion transference number and dynamic ion correlations in glyme- and sulfolane-based molten Li salt solvates	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 15214 ~ 15221
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0CP02181D	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Shigenobu Keisuke, Shibata Masayuki, Dokko Kaoru, Watanabe Masayoshi, Fujii Kenta, Ueno Kazuhide	4. 巻 23
2. 論文標題 Anion effects on Li ion transference number and dynamic ion correlations in glyme?Li salt equimolar mixtures	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 2622 ~ 2629
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0CP06381A	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Ugata Yosuke, Tataro Ryoichi, Mandai Toshihiko, Ueno Kazuhide, Watanabe Masayoshi, Dokko Kaoru	4. 巻 4
2. 論文標題 Understanding the Reductive Decomposition of Highly Concentrated Li Salt/Sulfolane Electrolytes during Li Deposition and Dissolution	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Applied Energy Materials	6. 最初と最後の頁 1851 ~ 1859
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsaem.0c02961	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tsuzuki Seiji, Kaneko Tomoaki, Sodeyama Keitaro, Umebayashi Yasuhiro, Shinoda Wataru, Seki Shiro, Ueno Kazuhide, Dokko Kaoru, Watanabe Masayoshi	4. 巻 23
2. 論文標題 Thermodynamic aspect of sulfur, polysulfide anion and lithium polysulfide: plausible reaction path during discharge of lithium/sulfur battery	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 6832 ~ 6840
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d0cp04898d	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Arai Nana, Watanabe Hikari, Nozaki Erika, Seki Shiro, Tsuzuki Seiji, Ueno Kazuhide, Dokko Kaoru, Watanabe Masayoshi, Kameda Yasuo, Umebayashi Yasuhiro	4. 巻 11
2. 論文標題 Speciation Analysis and Thermodynamic Criteria of Solvated Ionic Liquids: Ionic Liquids or Superconcentrated Solutions?	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 4517 ~ 4523
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.0c00906	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Watanabe Hikari, Arai Nana, Kameda Yasuo, Buchner Richard, Umebayashi Yasuhiro	4. 巻 124
2. 論文標題 Effect of Brønsted Acidity on Ion Conduction in Fluorinated Acetic Acid and N-Methylimidazole Equimolar Mixtures as Pseudo-protic Ionic Liquids	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 11157 ~ 11164
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpccb.0c07706	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 UMEBAYASHI Yasuhiro、ARAI Nana、WATANABE Hikari	4. 巻 69
2. 論文標題 Speciation of Electrolyte Solutions for Next Generation Storage Batteries and Investigation of Their Ionic Conduction Mechanism	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 BUNSEKI KAGAKU	6. 最初と最後の頁 271 ~ 278
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2116/bunsekikagaku.69.271	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 UMEBAYASHI Yasuhiro、ARAI Nana、WATANABE Hikari	4. 巻 88
2. 論文標題 Thermodynamic and structural aspects of solvated ionic liquids	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Denki Kagaku	6. 最初と最後の頁 114 ~ 120
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.5796/denkikagaku.20-FE0012	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Mandai Toshihiko、Dokko Kaoru、Watanabe Masayoshi	4. 巻 19
2. 論文標題 Solvate Ionic Liquids for Li, Na, K, and Mg Batteries	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Chemical Record	6. 最初と最後の頁 708 ~ 722
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/tcr.201800111	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ugata Yosuke、Thomas Morgan L.、Mandai Toshihiko、Ueno Kazuhide、Dokko Kaoru、Watanabe Masayoshi	4. 巻 21
2. 論文標題 Li-ion hopping conduction in highly concentrated lithium bis(fluorosulfonyl)amide/dinitrile liquid electrolytes	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 9759 ~ 9768
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C9CP01839E	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nakanishi Azusa, Ueno Kazuhide, Watanabe Daiki, Ugata Yosuke, Matsumae Yoshiharu, Liu Jiali, Thomas Morgan L., Dokko Kaoru, Watanabe Masayoshi	4. 巻 123
2. 論文標題 Sulfolane-Based Highly Concentrated Electrolytes of Lithium Bis(trifluoromethanesulfonyl)amide: Ionic Transport, Li-Ion Coordination, and Li-S Battery Performance	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 14229 ~ 14238
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b02625	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Tatara Ryoichi, Ueno Kazuhide, Dokko Kaoru, Watanabe Masayoshi	4. 巻 6
2. 論文標題 Thermodynamic Effect of Anion Activity on Electrochemical Reactions Involving Li Ions in Room Temperature Ionic Liquids	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ChemElectroChem	6. 最初と最後の頁 4444 ~ 4449
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/celec.201900973	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tamate Ryota, Saruwatari Aya, Nakanishi Azusa, Matsumae Yoshiharu, Ueno Kazuhide, Dokko Kaoru, Watanabe Masayoshi	4. 巻 109
2. 論文標題 Excellent dispersibility of single-walled carbon nanotubes in highly concentrated electrolytes and application to gel electrode for Li-S batteries	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Electrochemistry Communications	6. 最初と最後の頁 106598 ~ 106598
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.elecom.2019.106598	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Okamoto Yukihiko, Tsuzuki Seiji, Tatara Ryoichi, Ueno Kazuhide, Dokko Kaoru, Watanabe Masayoshi	4. 巻 124
2. 論文標題 High Transference Number of Na Ion in Liquid-State Sulfolane Solvates of Sodium Bis(fluorosulfonyl)amide	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 4459 ~ 4469
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b11458	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ugata Yosuke, Tataro Ryoichi, Ueno Kazuhide, Dokko Kaoru, Watanabe Masayoshi	4. 巻 152
2. 論文標題 Highly concentrated LiN(SO ₂ CF ₃) ₂ /dinitrile electrolytes: Liquid structures, transport properties, and electrochemistry	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 104502 ~ 104502
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5145340	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Watanabe Hikari, Umecky Tatsuya, Arai Nana, Nazet Andreas, Takamuku Toshiyuki, Harris Kenneth R., Kameda Yasuo, Buchner Richard, Umebayashi Yasuhiro	4. 巻 123
2. 論文標題 Possible Proton Conduction Mechanism in Pseudo-Protic Ionic Liquids: A Concept of Specific Proton Conduction	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 6244 ~ 6252
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b03185	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Arai Nana, Watanabe Hikari, Yamaguchi Tsuyoshi, Seki Shiro, Ueno Kazuhide, Dokko Kaoru, Watanabe Masayoshi, Kameda Yasuo, Buchner Richard, Umebayashi Yasuhiro	4. 巻 123
2. 論文標題 Dynamic Chelate Effect on the Li ⁺ -Ion Conduction in Solvate Ionic Liquids	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 30228 ~ 30233
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b10770	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Terada Shoshi, Susa Hiroko, Tsuzuki Seiji, Mandai Toshihiko, Ueno Kazuhide, Dokko Kaoru, Watanabe Masayoshi	4. 巻 122
2. 論文標題 Glyme-Sodium Bis(fluorosulfonyl)amide Complex Electrolytes for Sodium Ion Batteries	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 16589 ~ 16599
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.8b04367	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Tatara Ryoichi, Leverick Graham M., Feng Shuting, Wan Stefan, Terada Shoshi, Dokko Kaoru, Watanabe Masayoshi, Shao-Horn Yang	4. 巻 122
2. 論文標題 Tuning NaO2 Cube Sizes by Controlling Na+ and Solvent Activity in Na-O2 Batteries	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 18316 ~ 18328
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.8b05418	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Kondou Shinji, Nozaki Erika, Terada Shoshi, Thomas Morgan L., Ueno Kazuhide, Umebayashi Yasuhiro, Dokko Kaoru, Watanabe Masayoshi	4. 巻 122
2. 論文標題 Enhanced Electrochemical Stability of Molten Li Salt Hydrate Electrolytes by the Addition of Divalent Cations	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 20167 ~ 20175
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.8b06251	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Watanabe Masayoshi, Dokko Kaoru, Ueno Kazuhide, Thomas Morgan L.	4. 巻 91
2. 論文標題 From Ionic Liquids to Solvate Ionic Liquids: Challenges and Opportunities for Next Generation Battery Electrolytes	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Bulletin of the Chemical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 1660 ~ 1682
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20180216	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Dokko Kaoru, Watanabe Daiki, Ugata Yosuke, Thomas Morgan L., Tsuzuki Seiji, Shinoda Wataru, Hashimoto Kei, Ueno Kazuhide, Umebayashi Yasuhiro, Watanabe Masayoshi	4. 巻 122
2. 論文標題 Direct Evidence for Li Ion Hopping Conduction in Highly Concentrated Sulfolane-Based Liquid Electrolytes	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 10736 ~ 10745
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.8b09439	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Terada Shoshi, Ikeda Kohei, Ueno Kazuhide, Dokko Kaoru, Watanabe Masayoshi	4. 巻 72
2. 論文標題 Liquid Structures and Transport Properties of Lithium Bis(fluorosulfonyl)amide/Glyme Solvate Ionic Liquids for Lithium Batteries	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Australian Journal of Chemistry	6. 最初と最後の頁 70 ~ 70
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1071/CH18270	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kondou Shinji, Thomas Morgan L., Mandai Toshihiko, Ueno Kazuhide, Dokko Kaoru, Watanabe Masayoshi	4. 巻 21
2. 論文標題 Ionic transport in highly concentrated lithium bis(fluorosulfonyl)amide electrolytes with keto ester solvents: structural implications for ion hopping conduction in liquid electrolytes	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 5097 ~ 5105
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C9CP00425D	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計75件(うち招待講演 9件/うち国際学会 23件)

1. 発表者名 獨古 薫
2. 発表標題 非ワルデン的イオン伝導を示す溶液の基礎物性と電池への応用
3. 学会等名 イオン液体研究会(招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 齊木 詩緒里・玉 智英・多々良 涼一・上野 和英・獨古 薫・渡邊 正義
2. 発表標題 硫化物系固体電解質/濃厚電解液複合電解質の創製と物性評価
3. 学会等名 第69回高分子討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 獨古 薫・西村 笙・岡本 幸紘・多々良 涼一・上野 和英・渡邊 正義
2. 発表標題 High Transference Number of Na Ion in Highly Concentrated Na(NSO ₂ F) ₂ /γ-Butyrolactone Electrolytes for Sodium Batteries
3. 学会等名 PACIFIC RIM MEETING 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 宇賀田 洋介・笹川 祥平・渡部 大樹・上野 和英・渡邊 正義・獨古 薫
2. 発表標題 Effects of Anion Species on Li Ion Transport and Electrochemical Properties in Highly Concentrated Electrolytes
3. 学会等名 PACIFIC RIM MEETING 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 宇賀田 洋介・上野 和英・渡邊 正義・獨古 薫
2. 発表標題 High Transference Number of Li Ion in Highly Concentrated Lithium Bis(trifluoromethanesulfonyl)Amide/Dinitrile Liquid Electrolytes for Lithium Sulfur Batteries
3. 学会等名 PACIFIC RIM MEETING 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 齊木 詩緒里・玉 智英・多々良 涼一・獨古 薫・渡邊 正義・上野 和英
2. 発表標題 Composite Electrolytes Based on Sulfide-Based Solid Electrolytes and Highly Concentrated Electrolytes
3. 学会等名 PACIFIC RIM MEETING 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 獨古 薫・玉 智英・川村 出・上野 和英・渡邊 正義
2. 発表標題 Li _{1.5} Al _{10.5} Ti _{1.5} (P ₀₄) ₃ とリチウム塩溶媒和物含有ゲルからなる複合電解質の作製と評価
3. 学会等名 第46回固体イオニクス討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 田崎 菜摘・橋本 慧・宇賀田 洋介・藤城 美希・上野 和英・渡邊 正義・獨古 薫
2. 発表標題 高分子均一網目からなる高Li塩濃度ゲル電解質の物性と電池適用
3. 学会等名 電気化学会第88回大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 石川 凌太郎・橋本 慧・宇賀田 洋介・上野 和英・渡邊 正義・獨古 薫
2. 発表標題 カーボネート系濃厚電解液と四分岐ポリエチレングリコールから成るゲル電解質の基礎物性
3. 学会等名 電気化学会第88回大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 都築誠二
2. 発表標題 電気化学のための計算化学入門分子動力学計算
3. 学会等名 電気化学会関東支部セミナー
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 都築誠二、金子智昭、袖山慶太郎、梅林泰宏、篠田渉、関志朗、上野和英、獨古薫、渡邊正義
2. 発表標題 高精度量子化学計算を用いた電極中の硫黄の還元反応の解析
3. 学会等名 第61回電池討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 都築誠二
2. 発表標題 基底関数系や電子相関が分子間相互作用エネルギーの計算に与える影響：相互作用する分子の種類と計算手法の選択
3. 学会等名 CBI学会FMO研究会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 梅林泰宏、荒井奈々、渡辺日香里、川名結衣、西川慶、関志朗、都築誠二、上野和英、獨古薫、渡邊正義
2. 発表標題 リチウム-硫黄電池正極/正極不溶型電解液界面近傍における異常なイオン濃縮
3. 学会等名 電気化学会第88回大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 梅林 泰宏・;荒井 奈々・弓削 眞子・川名 結衣・渡辺 日香里・&都築 誠二・関 志朗・上野 和英・獨古 薫・渡邊 正義
2. 発表標題 正極不溶型リチウム-硫黄電池スルホラン系及びグライム系電解液のオペランド顕微Raman分光測定
3. 学会等名 日本分析化学会第69年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 渡辺 日香里・上野 和英・弓削 眞子・川名 結衣・板垣 昌幸・獨古 薫・渡邊 正義・梅林 泰宏
2. 発表標題 オペランドインピーダンス法による正極不溶型リチウム - 硫黄電池の放電反応に関する研究
3. 学会等名 日本分析化学会第69年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 梅林 泰宏・荒井 奈々・渡辺 日香里・弓削 眞子・川名 結衣・上野和英・関志朗・獨古薫・都築誠二・渡邊正義
2. 発表標題 正極不溶型リチウム - 硫黄電池のオペランド顕微Raman分光：電解質依存性
3. 学会等名 第61回電池討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 渡辺 日香里・上野和英・弓削 眞子・川名 結衣・獨古薫・渡邊正義・板垣昌幸・梅林泰宏
2. 発表標題 スルホラン系正極不溶型電解液を用いたリチウム - 硫電池の充放電中のインピーダンススペクトル解析
3. 学会等名 電気化学会第88回大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Kaoru Dokko, Yukihiro Okamoto, Kazuhide Ueno, Masayoshi Watanabe
2. 発表標題 Ion Conduction Mechanism in Highly Concentrated Sulfolane-Based Electrolytes for Sodium-Ion Batteries
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 西村 笙, 岡本 幸紘, 上野 和英, 獨古 薫, 渡邊 正義
2. 発表標題 - プチロラクトンを溶媒に用いたNa系高濃度電解液の溶液構造と電気化学特性
3. 学会等名 2019年電気化学秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 宇賀田洋介, 上野和英, 獨古薫, 渡邊正義
2. 発表標題 ジニトリルを溶媒に用いたLi塩高濃度電解液の基礎物性と電気化学特性
3. 学会等名 2019年電気化学秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 岡本 幸紘, 上野 和英, 獨古 薫, 渡邊 正義
2. 発表標題 Na塩-スルホン系溶媒高濃度電解液の物性と電気化学特性
3. 学会等名 2019年電気化学秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 岸田 夏輝, 宇賀田 洋介, 上野 和英, 獨古 薫, 渡邊 正義
2. 発表標題 リチウム塩/スルホン系溶媒濃厚電解液の基礎物性とリチウム硫黄電池への応用
3. 学会等名 2019年電気化学秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kaoru Dokko, Soma Suzuki, Shoshi Terada, Kei Hashimoto, Seiji Tsuzuki, Morgan L. Thomas, Toshihiko Mandai, Masayoshi Watanabe
2. 発表標題 Solvate Ionic Liquid Electrolytes for Mg Batteries
3. 学会等名 236th ECS Meeting (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yosuke Ugata, Kazuhide Ueno, Kaoru Dokko and Masayoshi Watanabe
2. 発表標題 Solvate Structures and Transport Properties in Highly Concentrated LiFSA/Succinonitrile Liquid Electrolyte
3. 学会等名 236th ECS Meeting (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 S. Sasagawa, Y. Ugata, K. Ueno, K. Dokko and M. Watanabe
2. 発表標題 Solvation structure and Li-ion transport properties of highly concentrated sulfone-based electrolytes
3. 学会等名 236th ECS Meeting (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Okamoto, S. Tsuzuki, K. Ueno, K. Dokko, and M. Watanabe
2. 発表標題 Liquid Structure and Battery Application of Highly Concentrated Sulfolane-based Sodium Electrolytes
3. 学会等名 236th ECS Meeting (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Keisuke Shigenobu, Kazuhide Ueno, Kaoru Dokko and Masayoshi Watanabe
2. 発表標題 Correlations between Molecular Structures and Transport Properties of Highly Concentrated Li-Salt Electrolytes
3. 学会等名 The 10th Asian Conference on Electrochemical Power Sources (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Natsuki Kishida, Yosuke Ugata, Kazuhide Ueno, Kaoru Dokko and Masayoshi Watanabe
2. 発表標題 Highly concentrated sulfone-based electrolytes for Li-S battery
3. 学会等名 The 10th Asian Conference on Electrochemical Power Sources (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Ock Jiyoung, Kazuhide Ueno, Kei Hashimoto, Kaoru Dokko and Masayoshi Watanabe
2. 発表標題 Composite Electrolytes Comprising Oxide Solid Electrolytes and Highly Concentrated Electrolyte Gels
3. 学会等名 The 10th Asian Conference on Electrochemical Power Sources (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 笹川 祥平, 宇賀田 洋介, 渡部 大樹, 上野 和英, 獨占 薫, 渡邊 正義
2. 発表標題 スルホン系溶媒を用いたLi塩高濃度電解液中におけるホッピング伝導
3. 学会等名 第60回電池討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 重信圭佑, 上野和英, 獨古薫, 渡邊正義
2. 発表標題 溶媒とイオン液体及び高濃度電解液におけるLiイオン輸送特性支配因子
3. 学会等名 電気化学会第87回大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 岸田 夏輝, 多々良 涼一, 張 旌君, 宇賀田 洋介, 上野 和英, 獨古 薫, 渡邊 正義
2. 発表標題 濃厚リチウム塩/プロピレンカーボネート溶液中における溶媒と構造とリチウムイオン輸率の関係
3. 学会等名 電気化学会第87回大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 宇賀田洋介, 上野和英, 獨古薫, 渡邊正義
2. 発表標題 Li塩/ジニトリル系高濃度電解液の基礎物性とLi-S電池への適用
3. 学会等名 電気化学会第87回大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 五十嵐 悠生, 西村 笙, 岡本 幸紘, 上野 和英, 獨古 薫, 渡邊 正義
2. 発表標題 溶融ナトリウム塩溶媒和物の液体構造とNaイオン輸率
3. 学会等名 電気化学会第87回大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kaoru Dokko, Yosuke Ugata, Shohei Sasagawa, Daiki Watanabe, Morgan L. Thomas, Kazuhide Ueno, Masayoshi Watanabe
2. 発表標題 Li-Ion Hopping Conduction in Highly Concentrated Electrolyte Solutions
3. 学会等名 6th International Conference on Advanced Capacitors (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 獨古 薫、上野 和英、渡邊 正義
2. 発表標題 溶融溶媒和物の特異なイオン伝導機構と電池適用の可能性
3. 学会等名 第108回新電池構想部会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kaoru Dokko, Yosuke Ugata, Shohei Sasagawa, Daiki Watanabe, Morgan L. Thomas, Kazuhide Ueno, Masayoshi Watanabe
2. 発表標題 Li-Ion Hopping Conduction in Highly Concentrated Li Salt/Sulfone Liquid Electrolytes
3. 学会等名 The 10th Asian Conference on Electrochemical Power Sources (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 都築誠二
2. 発表標題 グラフェン電極とイオン液体界面の液体構造
3. 学会等名 イオン液体研究会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 都築誠二
2. 発表標題 Accuracy of dispersion corrected DFT calculations for evaluating intermolecular interactions of organic molecules
3. 学会等名 9th Molecular Quantum Mechanics Conference (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 高橋圭太郎、石野優貴、高羽洋充、梅林泰宏、都築誠二、渡邊正義、関志朗
2. 発表標題 溶媒とイオン液体/希釈溶媒/高分子の組み合わせから成る電解質のLi-S電池特性および最適化方策の検討
3. 学会等名 第60回電池討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 都築誠二、森下徹也、篠田渉、袖山慶太郎、梅林泰宏、関志朗、上野和英、獨古薫、渡邊正義
2. 発表標題 ポリスルフィドアニオン、多硫化リチウムの構造と安定性
3. 学会等名 第60回電池討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 都築誠二、森下徹也、中村壮伸、篠田渉、関志朗、梅林泰宏、上野和英、獨古薫、渡邊正義
2. 発表標題 電荷を置いたグラフェン近傍のイオンの配向
3. 学会等名 第10回イオン液体討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 都築誠二、内丸忠文
2. 発表標題 分子間相互作用エネルギーの距離依存性
3. 学会等名 日本化学会 第100春季年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 荒井奈々、渡辺日香里、弓削眞子、都築誠二、上野和英、渡邊正義、獨古薫、梅林泰宏
2. 発表標題 スルホラン系電解液を用いた正極不溶性リチウム - 硫黄電池のオペランドRaman測定
3. 学会等名 日本分析化学会第68年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 荒井奈々、弓削眞子、渡辺日香里、都築誠二、上野和英、渡邊正義、獨古薫、 亀田 恭男、梅林泰宏
2. 発表標題 Raman分光の相補的最小二乗解析および6/7Li同位体置換中性子全散乱によるLiBF ₄ スルホラン溶媒和溶融塩のスペシエーション分析とLi+局所構造解析
3. 学会等名 第10回イオン液体討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 梅林 泰宏、渡辺 日香里、荒井 奈々、弓削 眞子、都築 誠二、関 志朗、上野 和英、獨古 薫、渡邊 正義
2. 発表標題 オペランドRaman分光・インピーダンス測定によるスルホラン不溶型リチウム - 硫黄電池の研究
3. 学会等名 第60回電池討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 弓削 眞子, 荒井 奈々, 渡辺日香里, 都築 誠二, 上野 和英, 渡邊 正義, 獨古 薫, 亀田 恭男, 梅林 泰宏
2. 発表標題 Raman分光相補的最小自乗解析によるスルホラン溶媒和溶融リチウム塩のスペシエーション分析
3. 学会等名 電気化学会第87回大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 弓削 眞子, 荒井 奈々, 渡辺日香里, 都築 誠二, 上野 和英, 渡邊 正義, 獨古 薫, 亀田 恭男, 梅林 泰宏
2. 発表標題 スルホラン系溶媒和LiBF ₄ 溶融塩のRamanスペクトル相補的最小自乗法によるスペシエーション分析
3. 学会等名 日本分析化学会第68年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 弓削眞子、荒井奈々、渡辺日香里、都築誠二、上野和英、渡邊正義、獨古薫、亀田恭男、梅林泰宏
2. 発表標題 スルホラン系溶媒和LiBF ₄ 溶融塩の分子軌道計算およびRamanスペクトルのスペシエーション分析
3. 学会等名 第33回新潟地区部会研究発表会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 弓削 眞子, 荒井 奈々, 渡辺日香里, 都築 誠二, 上野 和英, 渡邊 正義, 獨古 薫, 亀田 恭男, 梅林 泰宏
2. 発表標題 Ramanスペクトル相補的最小自乗解析によるLiBF ₄ スルホラン溶媒和溶融塩中のLi ⁺ 溶存構造
3. 学会等名 第42回溶液化学シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Seiji Tsuzuki
2. 発表標題 The effect of anion and graphene charges on liquid structures of graphene electrode-ionic liquid interface
3. 学会等名 Computational Sciences Workshop 2019 (CSW2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Seiji Tsuzuki
2. 発表標題 Role of intermolecular interaction in controlling structure and physicochemical properties of liquid
3. 学会等名 Joint Conference of EMLG/JMLG Meeting 2018 and 41st Symposium on Solution Chemistry of Japan (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 S. Tsuzuki, T. Nakamura, T. Morishita, W. Shinoda, S. Seki, Y. Umebayashi, H. Ueno, K. Dokko, M. Watanabe
2. 発表標題 Liquid structures of ionic liquids at graphene interface: Effects of anion and charges on graphene
3. 学会等名 6th Asian-Pacific Conference on Ionic Liquids & Green Processes (APCIL-6) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 S. Tsuzuki, T. Nakamura, T. Morishita, W. Shinoda, S. Seki, Y. Umebayashi, H. Ueno, K. Dokko, M. Watanabe
2. 発表標題 The effect of anion on the liquid structure of graphene electrode - ionic liquid interface
3. 学会等名 27th Conference on Molten Salts and Ionic Liquids-EuCheMSIL (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 K. Dokko, S. Terada, H. Susa, K. Ueno, M. Watanabe
2. 発表標題 Glyme-Na Salt Equimolar Complex Electrolytes for Sodium Ion Batteries
3. 学会等名 ECS and SMEQ Joint International Meeting (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kaoru Dokko
2. 発表標題 Li Salt-Glyme Complex Electrolytes for Lithium Sulfur Batteries
3. 学会等名 12th International Conference on Ceramic Materials and Components for Energy and Environmental Applications (CMCEE 2018) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 S. Kondo, S. Terada, K. Ueno, K. Dokko, M. Watanabe
2. 発表標題 Effect of Divalent Cation in Highly Concentrated Aqueous Electrolytes for Li Secondary Battery
3. 学会等名 22nd Topical Meeting of the International Society of Electrochemistry (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Y. Ugata, J. Zhang, D. Watanabe, S. Terada, K. Ueno, K. Dokko, M. Watanabe
2. 発表標題 Highly Concentrated Mixed-Li salt Electrolytes for High-Voltage Lithium-ion Batteries
3. 学会等名 22nd Topical Meeting of the International Society of Electrochemistry (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 荒井奈々, 渡辺日香里, 都築誠二, 亀田恭男, 上野和英, 渡邊正義, 獨古薫, 梅林泰宏
2. 発表標題 スルホラン系溶媒和リチウム溶融塩のLi+溶媒和構造とスペシエーション分析
3. 学会等名 電気化学会第86回大会(京都)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 宇賀田洋介, 上野和英, 獨古薫, 渡邊正義
2. 発表標題 Li塩とジニトリルから成る溶融錯体の基礎物性と電気化学特性
3. 学会等名 電気化学会第86回大会(京都)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 岡本 幸紘, 渡部 大樹, 寺田 尚志, 上野 和英, 獨古 薫, 渡邊 正義
2. 発表標題 スルホランを溶媒に用いたNa系高濃度電解液の溶液構造と電池適用
3. 学会等名 電気化学会第86回大会(京都)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 笹川 祥平, 宇賀田 洋介, 渡部 大樹, 上野 和英, 獨古 薫, 渡邊 正義
2. 発表標題 スルホン系Li塩高濃度電解液の溶液構造と輸送特性
3. 学会等名 電気化学会第86回大会(京都)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 都築誠二
2. 発表標題 分子間相互作用の精密解析と液体物性
3. 学会等名 凝縮系の理論化学2019 (石垣) (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 近藤 慎司, 野崎 永莉香, 寺田 尚志, Morgan L. Thomas, 上野 和英, 梅林 泰宏, 獨古 薫, 渡邊 正義
2. 発表標題 水系リチウム塩濃厚電解液の二価カチオン塩添加効果と電池適用
3. 学会等名 第59回電池討論会 (大阪)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 都築誠二
2. 発表標題 イオン液体電解液の古典分子動力学シミュレーション: 輸送物性と電極界面の液体構造
3. 学会等名 電気化学界面シミュレーションコンソーシアム第3回研究会 (東京) (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 野崎 永莉香, 渡辺 日香里, 荒井 奈々, 上野 和英, 獨古 薫, 渡邊 正義, 梅林 泰宏
2. 発表標題 種々の超濃厚Li塩水溶液中のLi + 伝導機構とLi + 局所構造
3. 学会等名 第9回イオン液体討論会 (鳥取)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 荒井奈々, 野崎永莉香, 渡辺日香里, 都築誠二, 上野和英, 渡邊正義, 獨古薫, 亀田恭男, 梅林泰宏
2. 発表標題 溶媒和リチウム溶融塩中のLi+溶媒和構造
3. 学会等名 第9回イオン液体討論会(鳥取)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 都築誠二, 松本一
2. 発表標題 四級アンモニウムのアルキル鎖への酸素の導入がイオンの拡散に与える影響
3. 学会等名 第9回イオン液体討論会(鳥取)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 岡本 幸紘, 渡部 大樹, 寺田 尚志, 上野 和英, 獨古 薫, 渡邊正義
2. 発表標題 スルホン系溶媒を用いたNa系高濃度電解液の溶液構造と輸送特性
3. 学会等名 2018年電気化学秋季大会(金沢大学角間キャンパス)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 宇賀田洋介, 近藤 慎司, 張 旌君, 渡部 大樹, 上野和英, 獨古薫, 渡邊正義
2. 発表標題 スルホン系溶媒を用いたLi系高濃度電解液の溶液構造と輸送特性
3. 学会等名 2018年電気化学秋季大会(金沢大学角間キャンパス)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 近藤 慎司, 野崎 永莉香, 寺田 尚志, M. L. Thomas, 上野 和英, 梅林 泰宏, 獨古 薫, 渡邊 正義
2. 発表標題 水系リチウム塩濃厚電解液の二価カチオン塩添加効果と電池適用
3. 学会等名 2018年電気化学秋季大会 (金沢大学角間キャンパス)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 張旌君, 多々良涼一, 文喜俊, 上野和英, 獨古薫, 渡邊正義
2. 発表標題 有機電解液中におけるグラファイト電極へのリチウムイオンと溶媒の共挿入電位の解析
3. 学会等名 第59回電池討論会 (大阪)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 獨古 薫, 鈴木 聡真, 橋本 慧, Morgan L. THOMAS, 万代 俊彦, 都築 誠二, 渡邊 正義
2. 発表標題 グライム - マグネシウム塩錯体の低融点化と電気化学特性
3. 学会等名 2018年電気化学秋季大会 (金沢大学角間キャンパス)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 野崎 永莉香, 渡辺 日香里, 荒井 奈々, 上野 和英, 獨古 薫, 渡邊 正義, 梅林 泰宏
2. 発表標題 リチウム塩水和溶融物のスペシエーション分析とリチウムイオン伝導メカニズム
3. 学会等名 第32回日本分析化学会関東支部新潟地区部会研究発表会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 都築誠二、中村壮伸、森下徹也、篠田涉、関志朗、梅林泰宏、上野和英、獨古薫、渡邊正義
2. 発表標題 グラフェンの構造や電荷がグラフェン - イオン液体界面の液体構造に与える影響
3. 学会等名 第12回分子科学討論会 (福岡)
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

https://ynu-estlab.jp/

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	都築 誠二 (Tsuzuki Seiji) (10357527)	横浜国立大学・先端科学高等研究院・非常勤教員 (12701)	
研究分担者	梅林 泰宏 (Umebayashi Yasuhiro) (90311836)	新潟大学・自然科学系・教授 (13101)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------