

令和 6 年 6 月 21 日現在

機関番号：32660

研究種目：若手研究

研究期間：2020～2023

課題番号：20K15382

研究課題名（和文）第一原理計算を用いた次世代マグネシウム二次電池用新規正極材料の探索

研究課題名（英文）Search for New Next Generation Cathode Materials for Magnesium Secondary Batteries using First-Principle Calculation

研究代表者

石橋 千晶 (Ishibashi, Chiaki)

東京理科大学・創域理工学部先端化学学科・助教

研究者番号：80801993

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,100,000円

研究成果の概要（和文）：本研究は、リチウムイオン電池に匹敵する新規電池材料としてマグネシウム二次電池正極材料に着目し、第一原理計算を用いた材料設計を行った。また、当研究室グループでは実際に材料合成を行い電気化学的試験も行っている。しかし、他種の遷移金属を含む複雑な組成の物質であるため、これまでは安定な局所構造が未解明であった。そこで、量子ビームを用いた結晶構造解析の結果を基に第一原理計算を用いた安定な局所構造を求め、各種遷移金属がMgの拡散に及ぼす影響を明らかにした。特に固溶体材料MgCo₂-xMnxO₄-Mg(Mg0.5V1.5Nix)O₄では充放電に伴う構造変化が少なく高いサイクル特性を示すことを予測した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究における最大のオリジナリティーは、静的な理論計算による新規マグネシウム二次電池正極材料の設計を行い、充放電過程における詳細なMgイオンの伝導経路メカニズムおよびイオン挿入量を解明する点である。特に、最先端のPDF解析や結晶構造解析を駆使した局所構造の解析も行うことで、リアリティーのある材料設計が可能である。理論計算で設計した新規材料を実際に合成し電池特性の測定を行い、そのデータを更に理論計算に還元し、置換種の再検討を行うことで、より電池特性が向上する系の設計を行う研究サイクルを形成でき、高い機能を備えた新規のマグネシウム二次電池正極材料を効率よく行うことができるという大きな意義をもつ。

研究成果の概要（英文）：This study focuses on magnesium secondary battery cathode materials as new battery materials comparable to lithium-ion batteries, and material design was performed using first-principles calculations. In this study, our group has actually synthesized the material and conducted electrochemical tests. However, the stable local structure of the material has not been clarified so far because of its complex composition including other transition metals. Therefore, we obtained stable local structures using first-principles calculations based on the results of crystal structure analysis using quantum beams, and clarified the effects of various transition metals on the diffusion of Mg. In particular, we predicted that the solid solution material MgCo₂-xMnxO₄-Mg(Mg_{0.5}V_{1.5}Nix)O₄ exhibits high cycle characteristics with little structural change with charge-discharge.

研究分野：電気化学

キーワード：マグネシウム二次電池 正極材料 第一原理計算

様式 C - 19、F - 19 - 1 (共通)

1. 研究開始当初の背景

リチウムイオン二次電池は、現在スマートフォンやノートパソコンの電源として用いられているが、昨今の環境問題の観点から電気自動車など大型機器への需要が高まっている。しかしながら、リチウムイオン電池の発火事故などが度々生じ、安全性の面で課題があり、リチウム金属そのものが資源量として少なく問題となっている。加えて、大型機器へ応用するには更に体積エネルギー密度の高い正極物質を開発する必要がある。そこで、注目されるものが 2 価のマグネシウムイオンである。金属マグネシウムのエネルギー密度は非常に大きく、リチウムイオンよりもはるかに高い単位体積当たりのエネルギー密度をもつため、高エネルギー密度の正極活物質を開発することができれば、リチウムイオン電池よりも大容量のエネルギーを高速で充放電できる画期的な次世代二次電池として大いに期待できる。また、マグネシウムは埋蔵量が豊富であり、リチウムやナトリウムよりも融点が高いため、低コストかつ高い安全性が見込まれ様々な場面で大いに活躍が期待される。現在、マグネシウム二次電池の研究開発は徐々に行われてきており、実際に正極と負極の合成および電池特性の評価が行われている。しかしながら、マグネシウムの電析が可能な電解液の種類が少なく、高い酸化還元電位を有する正極活物質の評価が困難である。また、Mg イオンの安定な挿入脱離が可能なホスト構造の探索も急がれており、現状、リチウムイオン二次電池に匹敵する特性を持つ材料は見つかっておらず Mg イオンの繰り返し充放電が可能な新規材料の探索が必要である。

2. 研究の目的

マグネシウム二次電池正極材の中でも特にスピネル型 $MgCo_2O_4$ は最大で 520mAh/g という非常に高い理論容量を持つことから、当研究室では中性子・放射光 X 線を用いた解析により平均構造を検討し、様々な条件で充放電試験を行い電池特性の測定を行っている。しかし、スピネル型 $MgCo_2O_4$ は相転移により予測される容量よりも放電容量が少ないという問題がある。そこで、Mg がより拡散しやすくするために Co の一部を Mn や Ni などの他の置換種に置き換えることで電池特性が向上するのではないかと考えられた。また、充放電過程において構造変化が生じる系の結晶構造を調べる際、平均構造の解析では電池特性を支配する要因を明らかにできないことも多く元素の配列を区別する局所構造解析が必要である。ここで、理論的予測があれば容易に局所構造解析をすることが可能である。そこで、申請者は実験と相補的に第一原理計算を用いた新規材料設計に取り組んでおり、構造緩和計算や電子密度計算を行い、充放電前および充放電過程における詳細な電子状態を調べてきた。この経験により、マグネシウム二次電池正極材料の電池特性を現状よりもさらに向上させるには、遷移金属の一部を他の遷移金属で置換するという方法が有効であること明らかになった。しかし、多様な遷移金属を様々な置換量で実際に合成し、電池特性を測定するのは非常に時間的・経済的にも困難である。そこで、第一原理計算を用いることで非常に高速かつ低コストな材料設計が可能になるのではないかと考えた。

3. 研究の方法

本研究では、第一原理計算を用いてマグネシウム二次電池正極材料の充放電前および放電、充電後の安定構造の探索を行った。マグネシウム二次電池正極として、スピネル型 $MgCo_{2-x}M_xO_4$ ($M=Mn, Ni$)、 $Mg(Mg_{0.5}V_{1.5-x}Ni_x)O_4$ 、 $Mg_4V_5O_{12}$ 、直方晶系 $MgV_{1-x}M_xO_3$ ($M=Ni, Co, Mn$)、固溶体材料 $MgCo_{2-x}Mn_xO_4$ - $Mg(Mg_{0.5}V_{1.5}Ni_x)O_4$ について検討した。また、同研究グループでは本研究に先立ち、上記の物質に対して合成実験を行い、元素組成分析だけでなく放射光 X 線を用いた結晶構造解析を行い、電気化学試験も実施し電池材料としての機能性の検討もを行っている。したがって、本研究で用いている安定構造のモデルは実験研究で得られた放射光 X 線結晶構造解析の結果に矛盾しない組成で作成した。更に、本研究で得られた、充放電前および充放電後のマグネシウム二次電池正極材料安定構造は、放射光 X 線全散乱測定によって得られる 2 体分布関数 $G(r)$ とフィッティングする PDF (Pair Distribution Function) 解析を行う事で、モデルの妥当性の検討を行った。また、得られた安定構造に対して、状態密度計算および電子密度計算を行い、原子間結合における各種遷移金属の影響を明らかにした。第一原理計算では、密度汎関数 (DFT) 法による構造緩和計算、状態密度計算および電子密度計算を実施した。空間群 $Fd\bar{3}m$ 、 $2 \times 1 \times 1$ スーパーセルの初期モデルを用いた。第一原理計算の計算プログラムは VASP¹⁾ を、PDF 解析は PDFgui²⁾ を用いた。

1) G. Kresse, J. Furthmüller, *Comput. Mater. Sci.*, **6**, 15-50 (1996).

2) C. L. Farrow, P. Juhas, J. W. Liu, D. Bryndin, E. S. Božin, J. Bloch, Th. Proffen and S. J. L. Billinge, *J Phys: Condens Matter*, **19**, 335219 1-9 (2007).

4. 研究成果

1) スピネル型 $MgCo_{2-x}M_xO_4$ ($M=Mn, Ni$) の研究成果

第一原理計算によって $MgCo_{1.5-x}M_xO_4$ ($M=Ni, Mn, x=0, 0.5$) の充放電前の安定構造の探索を行

ったところ、無置換体およびMn置換体と同様にMgが4配位の8aサイトのみ、CoとNiが6配位の16dサイトのみ占有される正スピネル構造が最安定構造として得られた。また、Niは互いに近い位置に配位するモデルほど安定であることが明らかになった。そこで、正スピネル構造の $MgCo_{1.5}Ni_{0.5}O_4$ 中の空孔である16cサイトへMgを挿入した放電時の安定構造を構造緩和計算にて求めた。その結果、空孔16cサイトへ挿入したMgは緩和前後で目立った変化はないが、周囲の8aサイトのMgは他の空孔16cサイト側へ大きく移動する構造変化が生じていることが明らかになった。すなわち、放電時にはスピネル型から岩塩型への構造変化が起きていることが分かった。この傾向はMn置換体の正スピネル構造へのMg挿入でも同様に生じる。しかし、NiおよびMn置換体とは異なり、無置換体($MgCo_2O_4$)の正スピネル構造へMgを挿入した際、8aサイトのMgの移動は非常に小さい。また、Mn置換体では挿入したMgに近接している8aサイトのMgのみの移動であったが、Ni置換体では、空孔16cサイトへMgが移動したことにより、更にその隣の8aサイト(第二近接)のMgも空孔16cサイト側へ大きく移動していることが明らかになった。つまり、Ni置換体ではMn置換体よりも多くのMgの移動が生じ、より岩塩型構造になりやすい傾向があることが分かった。本研究によって得られた充放電前および放電後の安定構造は放射光X線全散乱測定の結果から得られた二体分布関数GrとフィッティングするPDF解析を行った結果、互いに良好なフィッティングを示した。したがって、本研究で得られた安定構造は実験結果に矛盾しないことを証明した。

そこで、正スピネル構造へMgを $y=0.125\sim 0.5$ 挿入した際の安定構造を求め、充放電前とのエネルギー差Eを計算した。Fig.1に、無置換、NiおよびMn置換体のMg挿入量とEの関係を示す。無置換体の $x=0.125$ ではMgが挿入されたにも関わらず、充放電前よりも不安定であるため、正スピネル構造ではMgは挿入しにくい傾向であることが示された。一方、Mgの挿入に伴い、最も安定化する傾向を示すモデルはNi置換体であることがわかる。これは、Mgを16cサイトへ挿入した際、8aサイトにMgが存在したままでは両者の距離が近すぎるため反発が生じてしまうため、より岩塩化しやすい傾向のNi置換体が特にMgの挿入に従って安定化するのではないかと考えられる。

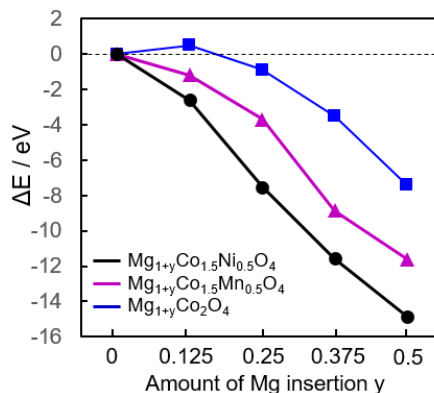


Fig.2 $Mg_{1+y}Co_{1.5-x}M_xO_4$ (M=Ni, Mn, $x=0, 0.5$, $y=0-0.5$)の放電過程におけるエネルギー変化 E

2) スピネル型 $Mg_{1.5-y}V_{1.5-x+y}Ni_xO_4$ の研究成果

第一原理計算を用いてスピネル型 $Mg_{1.33}V_{1.67-x}Ni_xO_4$ ($x=0, 0.13$)の充放電前および放電時の安定構造を求め、電子状態を明らかにした。構造緩和計算の結果から、放電時、Mgはスピネルの空孔16cサイトに挿入され、8aサイトのMgも空孔16cサイトへ移動することが明らかになった。放電時はスピネル型構造から岩塩型構造へ変化するが、1)で示した、同じスピネル型構造の $MgCo_{2-x}Mn_xO_4$ よりも放電時の構造変化量は少ない。そのため、 $MgCo_{2-x}Mn_xO_4$ よりも放電容量は得られないものの、充電時に可逆的構造変化できる可能性があることが明らかになった。また、電子密度計算より、Niを含む $x=0.13$ では $x=0$ よりもMg-O間の結合が弱くなり、充放電時にMgが結晶内を移動し易いことが明らかになった。また、 $x=0.13$ では $x=0$ よりも、特にV-O間の共有結合性が強くなるため、充放電時の $V-O_6$ 八面体のホスト構造が維持される傾向があることが明らかになった。また、PDOS計算により、主に充放電前はV原子は3~4個であったが、放電時は価数が低下していることが明らかになった。

3) 固溶体 $MgCo_{2-x}Mn_xO_4$ - $Mg(Mg_{0.5}V_{1.5}Ni_x)O_4$ の研究成果

$0.5MgCo_{1.5}Mn_{0.5}O_4$ - $0.5Mg_{1.33}V_{1.57}Ni_{0.1}O_4$ (MCMVNO03)の充放電前および放電後、充電後の安定構造を第一原理計算によって明らかにした。Fig. 1にMCMVNO03のa)充放電前の安定構造、b)充放電前の安定構造へMgを $y=0.615$ 挿入した放電時の安定構造を示す。放電時の安定構造は、充放電前のスピネル型構造中の空孔である16cサイトにMgを挿入して放電時の安定構造を探索した。b)に示した1st放電時の安定構造では、1), 2)で示した研究結果と同様に、8aサイトに配位していた原子が16cサイトへ移動していることが明らかになった。更に、b)で示した放電時のモデルからMgを同量脱離し、充放電前と同じMg量をもつ充電時の安定構造をc)に示

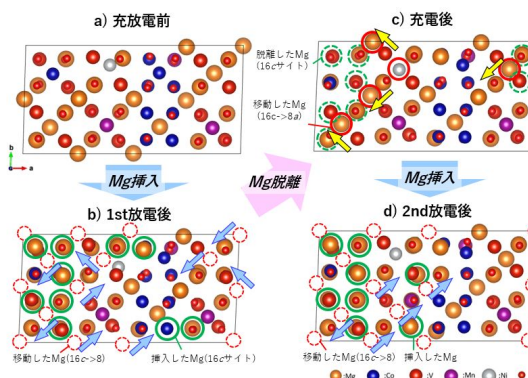


Fig.1 MCMVNO03のa) 充放電前、b) 1st放電後、c) 充電後、d) 2nd放電後の構造緩和計算後の安定構造

す。c)では、b)に示した1st放電時の安定構造とは逆に、16cサイトに存在したMgが8aサイトへ移動し占有されている構造変化が生じていることが明らかになった。放電時に構造変化が激しいモデルでは、Mgを挿入量と同量分脱離しても、8aサイトが空孔のままであった。また、16cサイトに配位しているCo原子はMgのように空孔8aサイトへ移動しなかった。この原因はCoはMgに比べて酸素との結合が強いため、酸素と結合を切断して結晶内を移動することが困難であるためである。したがって、放電時にCoのように酸素との結合性が強い原子が16cサイトに移動してしまうとFig.1に示すように8aサイトに戻る事が出来ない。したがって、充放電に伴う可逆的な構造変化を可能にするためには、カチオンミキシングを低減すること、もしくはミキシングした遷移金属が充放電中も4配位に留まることが重要であることが明らかになった。また、充電後のモデルに対してMgを挿入した2nd放電後のモデルを作成し、構造緩和計算を行った(Fig. 1 d)。その結果、一部の8aサイトのMgが16cサイトに移動し岩塩相を形成していることが明らかになった。また、c)に示す充電の安定構造と比較して岩塩相が増加し、放電時に16cサイトに配位していたMnは8aサイトに移動することが分かった。d)に示す2nd放電時の安定構造内の8aサイト付近に存在する原子の個数は、b)に示す1st放電の安定構造とほぼ同程度であることが明らかになった。すなわち、2サイクル目に充放電した際でも構造的可逆性が保たれることが本研究によって明らかになり、これが良好なサイクル特性の一因であることが本研究によって明らかになった。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計9件（うち査読付論文 9件/うち国際共著 5件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Chiaki Ishibashi, Naoya Ishida, Naoto Kitamura, Yasushi Idemoto	4. 巻 221
2. 論文標題 First-principle calculations of stable configurations and electronic structures of pristine and discharged spinel Mg _{1.31} V _{1.67} -xNi _x O ₄ (x = 0, 0.13) as cathode materials for magnesium secondary batteries	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 112087
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.commat.2023.112087	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 Naoto Kitamura, Tomoya Imura, Naoya Ishida, Chiaki Ishibashi, Yasushi Idemoto	4. 巻 7
2. 論文標題 Facile Surface Modification of MgMn ₂ O ₄ Positive-Electrode Material for Improving Cycle Performance of Magnesium Rechargeable Batteries	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 46915 - 46921
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.2c06633	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 Naoto Kitamura, Yoichiro Konishi, Wenli Ma, Naoya Ishida, Toshihiko Mandai, Chiaki Ishibashi, Yasushi Idemoto	4. 巻 12
2. 論文標題 Positive electrode properties and crystal structures of Mg-rich transition metal oxides for magnesium rechargeable batteries	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 18097
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-022-23022-1	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 Yasushi Idemoto, Mina Takamatsu, Chiaki Ishibashi, Naoya Ishida, Toshihiko Mandai, Naoto Kitamura	4. 巻 928
2. 論文標題 Electrochemical properties and crystal and electronic structure changes during charge/discharge of spinel type cathode-materials Mg _{1.33} V _{1.67} -xMn _x O ₄ for magnesium secondary batteries	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Electroanalytical Chemistry	6. 最初と最後の頁 1107064
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jelechem.2022.117064	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 Ishibashi Chiaki, Ichiyama Mai, Ishida Naoya, Kitamura Naoto, Idemoto Yasushi	4. 巻 26
2. 論文標題 First-principles calculations of stable local structures and electronic structures of magnesium secondary battery cathode materials, MgCo ₂ -xMnxO ₄ (x=0, 0.5), in second charged state after first discharge	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Solid State Electrochemistry	6. 最初と最後の頁 663 ~ 682
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10008-021-05098-3	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 IDEMOTO Yasushi, OKADA Ren, ISHIDA Naoya, ISHIBASHI Chiaki, MANDAI Toshihiko, KITAMURA Naoto	4. 巻 90
2. 論文標題 Electrochemical Properties and Crystal and Electronic Structures of Spinel MgCo ₂ -xMnxO ₄ -(1-y)Mg(Mg _{0.33} V _{1.67} -yNi _y)O ₄ for Magnesium Secondary Batteries	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Electrochemistry	6. 最初と最後の頁 027002 ~ 027002
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.5796/electrochemistry.21-00123	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 ISHIBASHI Chiaki, ICHIYAMA Mai, ISHIDA Naoya, KITAMURA Naoto, IDEMOTO Yasushi	4. 巻 89
2. 論文標題 Theoretical Study Using First-Principles Calculations of the Electronic Structures of Magnesium Secondary Battery Cathode Materials MgCo ₂ - xMnxO ₄ (x = 0, 0.5) in the Pristine and Discharged States	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Electrochemistry	6. 最初と最後の頁 256 ~ 266
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.5796/electrochemistry.21-00024	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 Chiaki ISHIBASHI, Naoya ISHIDA, Naoto KITAMURA, Yasushi IDEMOTO	4. 巻 55
2. 論文標題 Determining the crystal and electronic structures of the magnesium secondary battery cathode material MgCo ₂ xMnxO ₄ using first-principles calculations and a quantum beam during discharge	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Materials Science	6. 最初と最後の頁 13852-13870
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10853-020-04979-8	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33件(うち招待講演 0件/うち国際学会 2件)

1. 発表者名 C. Ishibashi, R. Takeuchi, Y. Hirata, N. Ishida, N. Kitamura, and Y. Idemoto
2. 発表標題 Investigation of Stable Structures and Electronic States of Spinel $MgCo_2 - zNi_{0.5}MnAlzO_4$ ($z = 0, 0.3$) during Discharge Process As Cathode Materials for Magnesium Rechargeable Batteries Using First-Principles Calculations
3. 学会等名 244th ECS Meeting (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 伊美 龍志、石橋 千晶、北村 尚斗、井手本 康
2. 発表標題 Mg二次電池正極材料 $Mg_{1+x}V_{2-x-y}MyO_4$ の第一原理計算を用いた安定構造と電子状態の解明
3. 学会等名 2024年第71回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 竹内 稜、石橋 千晶、北村 尚斗、井手本 康
2. 発表標題 Mg二次電池正極材料 $Mg(Co, Mn, Ni, M)_2O_4$ (M: 置換種)の第一原理計算を用いた安定構造と電子構造および置換種の効果の解明
3. 学会等名 2024年第71回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 荻田 優介、石橋 千晶、北村 尚斗、井手本 康
2. 発表標題 スピネル型 $0.3MgCo_{1.5}Mn_{0.5}O_4 - 0.7Mg_{1.33}V_{1.57}Ni_{0.104}$ の第一原理計算を用いた2サイクル充放電過程におけるMgの挿入および脱離メカニズムの解明と電子状態の解明
3. 学会等名 2024年第71回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 竹内 稜、石橋 千晶、北村 尚斗、井手本 康
2. 発表標題 Mg 二次電池正極材料 $MgCo_{2-x-y-z}Ni_xMn_yAl_zO_4$ の第一原理計算を用いた充放電過程におけるMg の挿入・脱離メカニズムおよび電子構造の解明
3. 学会等名 第64回電池討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 荻田 優介、石橋 千晶、北村 尚斗、井手本 康
2. 発表標題 スピネル型 $0.3MgCo1.5Mn0.5O_4-0.7Mg1.33V1.57Ni0.1O_4$ の第一原理計算を用いた充電-放電後におけるMgの挿入メカニズムの解明と電子状態の解明
3. 学会等名 粉体粉末冶金協会2023年度秋季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 石橋 千晶、伊美 龍志、北村 尚斗、井手本 康
2. 発表標題 Mg二次電池正極材料 $Mg_{1+x}V_2-y-xMn_yO_4$ の第一原理計算を用いた安定構造の解明
3. 学会等名 粉体粉末冶金協会2023年度秋季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 竹内 稜、石橋 千晶、北村 尚斗、井手本 康
2. 発表標題 Mg二次電池正極材料 $MgCo_{2-x-y-z}Ni_xMn_yAl_zO_4$ の第一原理計算を用いた充電過程における安定構造および電子構造解析
3. 学会等名 2023電気化学秋季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 荻田 優介、石橋 千晶、北村 尚斗、井手本 康
2. 発表標題 第一原理計算を用いたスピネル型 $0.3\text{MgCo}_1.5\text{Mn}_0.504\text{-}0.7\text{Mg}_1.33\text{V}_1.57\text{Ni}_0.104$ の充放電過程における安定構造の解明と電子構造解析
3. 学会等名 2023電気化学秋季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 荻田 優介、石橋 千晶、北村 尚斗、井手本 康
2. 発表標題 スピネル型 $0.3\text{MgCo}_1.5\text{Mn}_0.504\text{-}0.7\text{Mg}_1.33\text{V}_1.57\text{Ni}_0.104$ 系酸化物の第一原理計算を用いた放電過程における局所構造の解明と電子構造解析
3. 学会等名 日本化学会第103春季年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 竹内 稜、石橋 千晶、北村 尚斗、井手本 康
2. 発表標題 Mg二次電池正極材料 $\text{MgCo}_2\text{-x-y-zNi}_x\text{Mn}_y\text{Al}_z\text{O}_4$ 系酸化物の第一原理計算を用いた放電過程における安定構造および電子構造解析
3. 学会等名 電気化学会第90回大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 熊谷 真一、石橋 千晶、北村 尚斗、井手本 康
2. 発表標題 Mg二次電池正極材料 $0.3\text{MgCo}_2\text{-xMn}_x\text{O}_4\text{-}0.7\text{Mg}(\text{Mg}_0.33\text{V}_1.67\text{-yNi}_y)\text{O}_4$ の合成と電池特性、結晶・電子構造の解析
3. 学会等名 電気化学会第90回大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 竹内 稜、石橋 千晶、北村 尚斗、井手本 康
2. 発表標題 Mg二次電池正極材料 $MgCo_{2-x-y-z}Ni_xMn_yAl_zO_4$ 系酸化物の第一原理計算を用いた放電過程における安定構造および電子構造解析
3. 学会等名 電気化学会第90回大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 乗竹 諒、北村 尚斗、石橋 千晶、井手本 康
2. 発表標題 MgMn $_{2O_4}$ のMo、Al表面修飾による正極特性の検討および結晶・電子構造解析
3. 学会等名 電気化学会第90回大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 久保田 寿々、石橋 千晶、北村 尚斗、井手本 康
2. 発表標題 マグネシウム二次電池正極材料 $MgCo_{2-x-y-z}Ni_xMn_yAl_zO_4$ の高温・室温における電池特性および結晶・電子構造の組成依存
3. 学会等名 電気化学会第90回大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 松岡 康平・石橋 千晶・北村 尚斗・井手本 康
2. 発表標題 Mg 二次電池用スピネル型正極材料 $MgCo_{2-x}Ni_xO_4-(1-x)Mg(Mg_{0.33V1.67-y}Ni_y)O_4$ の電池特性、平均・局所構造
3. 学会等名 日本セラミックス協会 2023年年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 小野里 要、北村 尚斗、石橋 千晶、井手本 康
2. 発表標題 (Mg, Zn)-Mn-O系マグネシウム二次電池正極材料の正極特性および結晶・電子構造の検討
3. 学会等名 第63回電池討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 馬 駿力、北村 尚斗、石橋 千晶、井手本 康
2. 発表標題 スピネル型(Mg,Zn)(Co,Fe,Mn)2O4の正極特性と量子ビームを用いた平均・局所構造解析
3. 学会等名 第63回電池討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 井手本 康、熊谷 真一、北村 尚斗、石橋 千晶
2. 発表標題 Mg 二次電池正極材料 0.3MgCo ₂ -xMnxO ₄ -0.7Mg(Mg _{0.33} V _{1.67} -yNi _y)O ₄ の合成と 電池特性、結晶・電子構造
3. 学会等名 日本セラミックス協会 第35回秋季シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 井手本 康、久保田 寿々、北村 尚斗、石橋 千晶
2. 発表標題 マグネシウム二次電池正極材料 MgCo ₂ -x-y-zNi _x MnyAl _z O ₄ の電池特性および結晶・電子構造の組成依存
3. 学会等名 日本セラミックス協会 第35回秋季シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 石橋 千晶、竹内 稜、北村 尚斗、井手本 康
2. 発表標題 スピネル型 $MgCo_{2-x-y-z}Ni_xMn_yAl_zO_4$ 系酸化物の第一原理計算を用いた安定構造および電子構造解析
3. 学会等名 2022年電気化学秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 石橋 千晶、荻田 優介、北村 尚斗、井手本 康
2. 発表標題 スピネル型 $0.3MgCo_{1.5}Mn_{0.5}O_4-(1-)Mg_{1.33}V_{1.57}Ni_{0.104}$ 系酸化物の第一原理計算を用いた放電時の安定構造および電子構造解析
3. 学会等名 2022年電気化学秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 北村 尚斗、馬 駿力、石橋 千晶、井手本 康
2. 発表標題 スピネル型(Mg, Zn)(Co, Fe, Mn) O_4 の合成と正極特性および平均・局所構造の検討
3. 学会等名 2022年電気化学秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 高松 実奈、石橋 千晶、石田 直哉、北村 尚斗、井手本 康
2. 発表標題 Mg二次電池正極材料 $Mg_{1.33-y}(V_{1.67-x+y}Mn_x)O_4$ の電気化学特性と量子ビームを用いた充放電過程の平均・局所・電子構造の組成依存
3. 学会等名 電気化学会第89回大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 阪上 有理、北村 尚斗、石橋 千晶、井手本 康
2. 発表標題 Mg二次電池用正極材料 $Mg_{1+z}Co_{2-x-z}Mn_xNi_yO_4$ スピネルの電池特性と平均構造，電子構造の熱処理依存
3. 学会等名 第26回シンポジウム「光触媒反応の最近の展開」 2020年度 東京理科大学 光触媒研究推進拠点 成果報告会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 松岡 康平，石橋 千晶，北村 尚斗、井手本 康
2. 発表標題 Mg 二次電池スピネル型正極材料 $MgCo_{2-x}Ni_xO_4 - (1 -) Mg (Mg_{0.33}V_{1.67-y}Ni_y) O_4$ の電池特性、結晶・電子構造の組成依存
3. 学会等名 第 60 回セラミックス基礎科学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 高松 実奈、石橋 千晶、石田 直哉、北村 尚斗、井手本 康
2. 発表標題 Mg二次電池正極材料 $Mg_{1.33-y}(V_{1.67-x+y}Mn_x)O_4$ の電池特性と量子ビームを用いた平均・局所・電子構造解析の組成依存
3. 学会等名 第62回電池討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 阪上 有理、石橋 千晶、北村 尚斗、井手本 康
2. 発表標題 Mg二次電池用スピネル型正極材料 $Mg_{1+z}Co_{2-x-y}Mn_xNi_yO_4$ の電池特性と平均・電子構造の熱処理依存
3. 学会等名 粉体粉末冶金協会2021年度秋季大会（第128回講演大会）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高松 実奈, 石橋 千晶, 北村 尚斗, 井手本 康
2. 発表標題 Mg 二次電池スピネル型正極材料 $Mg_{1.33+y}(V_{1.67-x-y}Mn_x)O_4$ の電池特性と量子ビームを用いた充放電後の平均・局所・電子構造解析
3. 学会等名 2021年 電気化学秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高松 実奈, 石橋 千晶, 石田 直哉, 北村 尚斗, 井手本 康,
2. 発表標題 Mg 二次電池スピネル型正極材料 $Mg_{1.33+y}(V_{1.67-x-y}Mn_x)O_4$ の電池特性と量子ビームを用いた充放電後の平均・局所・電子構造解析
3. 学会等名 2021年 電気化学秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 石橋 千晶, 一山 舞, 石田 直哉, 北村 尚斗, 井手本 康
2. 発表標題 第一原理計算を用いたマグネシウム二次電池正極材料 $MgCo_{2-x}Mn_xO_4$ 系酸化物の充電時の結晶構造と電子状態の解明
3. 学会等名 電気化学会 電気化学会第87回大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 C. Ishibashi, N. Kawakami, N. Ishida, N. Kitamura, Y. Idemoto
2. 発表標題 Stable Structure and Electronic Structure for $Mg(Mg_xV_yNi_z)O_4$ As Cathode Material for Magnesium Secondary Battery in Discharge Process Using First-Principle Calculation
3. 学会等名 PRIME 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 石橋 千晶, 石田 直哉, 北村 尚斗, 井手本 康
2. 発表標題 マグネシウム二次電池正極材料MgCo ₂ -xMnxO ₄ 系酸化物の理論計算を用いた充電後の安定構造および電子構造解析
3. 学会等名 第61回電池討論会
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

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
研究協力者	井手本 康 (Yasushi Idemoto)		
研究協力者	北村 尚斗 (Kitamura Naoto)		

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
---------	---------