

令和 5 年 6 月 14 日現在

機関番号：15501

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2020～2022

課題番号：20H02823

研究課題名(和文) 超濃厚電解液のイオン集合様態制御に基づく電池特性の分子レベルデザイン

研究課題名(英文) Molecular design based on controlled ion-ordered structure in highly concentrated battery electrolytes

研究代表者

藤井 健太 (Fujii, Kenta)

山口大学・大学院創成科学研究科・教授

研究者番号：20432883

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,300,000円

研究成果の概要(和文)：Liイオン電池用超濃厚電解液の機能設計に関わる諸問題を分子間相互作用の理解と制御により解決することを大きな目的とした。具体的には、下記3点について実験・理論の両面から検討を行った。

(1) 超濃厚電解液中に特有なLiイオン集合様態の構造およびエネルギー的安定性について、散乱・分光実験および計算化学的手法により分子レベルで明らかにした。(2) in-situ表面増強赤外分光法を中心として、電極/電解液界面近傍の構造形成に及ぼす電位依存性をその場観測するとともに、理論的検証を行った。(3) 汎用的な負極・正極材料を用いて、(1)(2)で機能設計した超濃厚電解液の電池特性を評価した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

高濃度のLi塩を溶解した超濃厚電解液の構造およびエネルギー的特性を分子レベルで解明し、Liイオン電池電解液の性能を分子レベルで設計することを目的とした基礎研究を遂行した。超濃厚電解液のバルク構造および電極界面構造を実験・理論の両面から調べた結果、超濃厚化に伴うLiイオンの秩序構造形成が電気化学特性と密接に関係しており、その構造秩序性は塩濃度に加えて、溶媒分子の特徴(主に、分子サイズと電子対供与性)に強く依存することを見出した。これらの結果に基づき、溶液化学的観点で超濃厚電解液の特性を制御することが電池電極反応のメカニズム解明、引いては、電池特性の向上に有効であることを指摘した。

研究成果の概要(英文)：We investigated structural and electrochemical properties of highly concentrated Li-ion battery (LIB) electrolytes via both experimental and theoretical techniques. Major topics were shown below.

(1) Structural and thermodynamic properties of Li ion-ordered complexes in highly concentrated electrolytes were investigated by experimental (mainly, X-ray scattering and vibrational spectroscopy) and all-atom molecular dynamics (MD) simulations. (2) in-situ SEIRA spectra were measured for highly concentrated electrolyte to elucidate the electrode/electrolyte interface structure, and the results were compared with those from MD simulations. (3) LIB performance of the highly concentrated electrolytes was evaluated via systematic electrochemical measurements for commonly used LIB electrode materials to optimize electrolyte composition.

研究分野：溶液化学

キーワード：Liイオン電池 電解質溶液 超濃厚電解液 溶液構造解析 イオン秩序構造

1. 研究開始当初の背景

従来の電池用電解液は、LiX 塩 (X: 対アニオン)・有機溶媒・添加剤の種類や混合組成を試行錯誤的に調節し、イオン伝導度や粘度等のマクロ物性、電位窓、電池容量等を実測することで評価されてきた。結果として、カーボネート系混合溶媒に LiPF₆ 塩 (1 M 程度) で溶解した商用有機電解液が確立された。最近、高濃度の Li 塩 (塩に対する溶媒のモル比が 1~3 倍程度) を溶解した「超濃厚電解液」が実用レベルの新規リチウムイオン電池(LIB)用電解液として注目されている。その特徴は、(1)塩濃度を高めるという単純な操作のみで溶媒種の限定が取り扱うことができる、(2)様々な溶媒が適用可能となる、(3)電極上に不動態被膜を形成するための添加剤を必要としない点にある。従来型評価の蓄積により、最高塩濃度と電池性能(レート特性、サイクル特性等)は溶媒と LiX 塩の組み合わせに強く依存することが周知され、いくつかの LiX 塩/溶媒組では商用電解液の性能を大きく上回ることが報告されている[1]。しかしながら、電解液の構成成分や基礎物性と電池特性を繋ぐ原理原則は不明であり、反応化学種である Li イオンの溶存状態(溶媒和構造、溶媒和自由エネルギー)すら分子レベルでは分かっていなかった。第一原理計算によると、超濃厚電解液では、全ての溶媒分子とアニオン X が Li イオンに配位しており、この特殊な溶液構造が電解液の還元安定性をもたらし、黒鉛負極に対する可逆的な電極反応を引き起こすことが報告されている[2,3]。しかしながら、超濃厚系の本質であるナノスケールでのイオン集合体を可視化するには至っておらず、これが電池電極反応とどのような相関にあるのかは全く未知であった。

2. 研究の目的

本研究では、超濃厚電解液を「Li イオン・対アニオン・溶媒分子の 3 成分間の相互作用により規定できる反応場集合体」として捉え、電解液機能設計に関する諸問題を分子間相互作用の理解と制御によって解決することを目的とした。具代的な目的を以下に列挙する。

(1) Li イオン集合様態の構造およびエネルギーの定量化

超濃厚電解液で特有な Li イオンの集合様態を構造とエネルギーの二軸で定量化する。動径分布関数解析(放射光 X 線/中性子散乱+MD)により集合構造(多核錯体構造)を可視化し、自由エネルギー解析により Li イオンの安定性を決定する。溶媒分子のサイズ・形、配位能に着眼した集合様態制御により、不安定な Li イオン(脱溶媒和し易い Li イオン)を設計する。

(2) 電極/電解液界面での Li イオン集合様態のその場観察

in-situ 表面増強赤外分光法により、電位加印に伴う界面近傍の構造変化過程をその場観察する。界面に特有の「集合様態」と「脱溶媒和挙動」を解明し、①との相違性・類似性を抽出することで「バルクと界面の連動性」を議論する。電場を考慮した MD により、電極近傍の成分密度分布を解析し、界面構造を可視化する。

(3) Li イオン集合様態制御による電池特性の分子レベルデザイン

Li イオン電池の汎用電極材料を対象として電気化学測定を行い、電極材料との適合性や反応性に及ぼす集合様態制御の効果を調べる。上記 1~3 を総合して、超濃厚電解液を用いた Li イオン電池の性能を分子レベルでデザインする。

3. 研究の方法

超濃厚電解液では全ての溶媒分子が Li イオンに配位するため、遊離溶媒はほとんど存在しない。よって、溶媒分子の「配位子」としての個性が際立ち、金属イオンへの配位力を示す「Gutmann ドナー数」や溶媒和錯体内の立体障害を左右する「分子サイズ」が溶媒選択の有効な指標となる。数ある溶媒パラメータの内、上記 2 つを操作変数として選択し、LiX 塩/溶媒ペアを系統的に組み替えることで集合様態制御に関わる本質因子を特定するための研究を進めた (Fig. 1)。

ここで、上記の目的 1~3 は、(1) バルク電解液、(2) 電極界面、(3) 電池電極反応を対象とした研究に対応している。各研究ステージについて、具体的な研究手法を以下に列挙する。

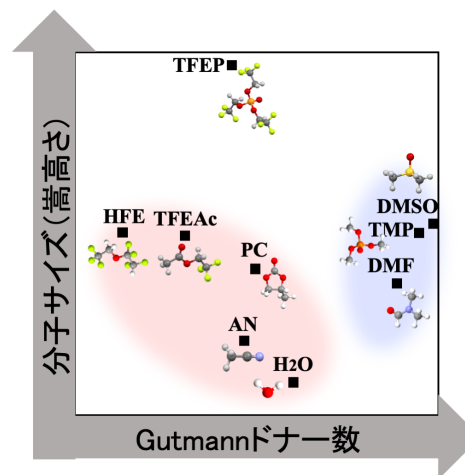


Fig. 1 Solvent species used for the concentrated electrolyte systems in this work.

(1) バルク電解液：種々の超濃厚電解液に対して、高エネルギーX線全散乱と分子動力学(MD)シミュレーションを融合した独自の動径分布関数解析を適用し、Li イオン集合体の平均構造を決定した。集合様態の変化に伴う溶媒分子と対アニオンの相互作用距離・配向を分布関数として表記し、全原子 MD を融合した定量解析を経由して、ナノスケール構造を可視化した。また、Raman 分光および赤外吸収スペクトル測定により、Li イオン周りの局所構造、すなわち、アニオン・溶媒分子の平均配位数を決定した。さらに、エネルギー表示溶液理論と MD を組合せた自由エネルギー解析に着手し、集合体内部の Li イオンの溶媒和自由エネルギーを決定するための基盤技術を整えた。

(2) 電極界面：in-situ 表面増強赤外分光法により電位を制御しながら界面近傍を直接顕微することで、界面形成プロセスをその場観察した。これにより、電極界面近傍の溶媒分子やアニオン成分を個別に検出することができるため、界面形成過程における脱溶媒和種の選択性や電気化学的分解による不動態皮膜形成について分子レベルで議論した。また、グラファイト負極の Li 挿入反応をモデル系として、交流インピーダンス測定により界面抵抗の温度依存性を実測し、電極界面で起こる電荷移動反応の活性化エネルギーを決定した。さらに、理論的な検証方法として、電場を考慮した全原子 MD シミュレーションに新たに着手した。界面近傍における各化学種の成分密度分布を電極からの距離 r に関する関数として解析し、表面増強赤外分光の実測結果を検証するための準備を整えた。

(3) 電池電極反応：Li イオン電池分野における一般的な電極材料（負極：グラファイト負極、正極：LiCoO₂ など）を対象として、酸化還元挙動や充放電特性など、一連の電気化学的測定により電極材料との適合性に及ぼす超濃厚化の効果を総合的に判断した。上記の研究 1～3 を総合することで、バルク構造・界面構造と電極反応の相関を明らかにし、電池性能を分子レベルでデザインするための重要因子がなにであるのかについて議論した。

4. 研究成果

高濃度の Li 塩を溶解した有機電解液およびイオン液体電解液に対して、実験・計算化学的手法を融合した構造化学研究を進め、濃厚電解液中の Li イオンの溶存状態を分子レベルで解析した。一例として、不燃性を示すフッ素化リン酸エステル (tris(2,2,2-trifluoroethyl)phosphate : TFEP) と LiFSA 塩からなる電解液系の高エネルギーX線全散乱実験 (HEXTS) および全原子 MD シミュレーションにより得られた動径分布関数 (RDF) を Fig. 2 に示す。MD により得られた計算 RDF (実線) は実測値 (黒丸) をよく再現しており、MD 結果を詳細に解析することで Li イオン周りの局所構造や超濃厚系に特有なイオン秩序構造 (長距離構造) を評価した。結果として、希薄電解液 (塩濃度: $c_{Li} < 1$ M) では、Li イオンには TFEP 分子と FSA アニオンが競合配位したイオン対錯体を形成すること、これは TFEP 分子の嵩高さ (分子体積: 288.6 Å³) に由来する溶媒和の立体効果に由来することがわかった。そこで、

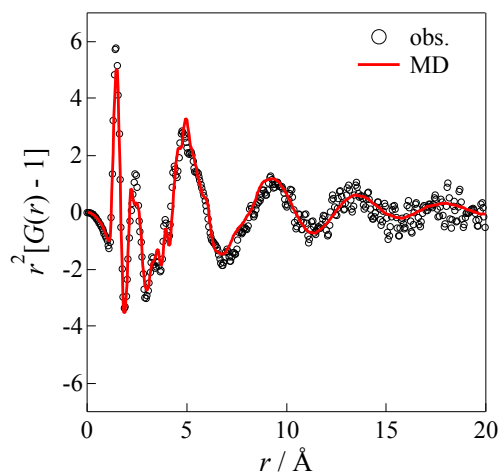


Fig. 2 Radial distribution functions obtained for highly concentrated LiFSA/TFEE electrolyte with AN molecules by HEXTS experiments and MD simulations.

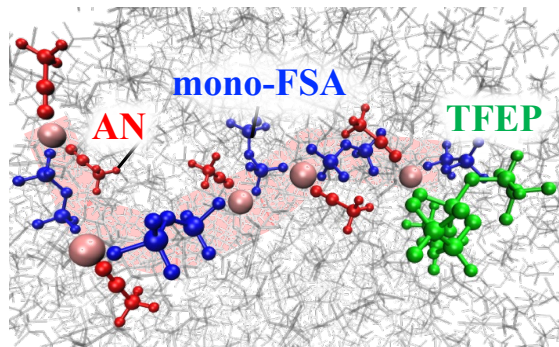


Fig. 3 Orderd Li-ion structure found in the MD simulation box for highly concentrated LiFSA/TFEE electrolyte with AN molecules.

LiFSA/TFEP 電解液中に分子サイズが小さいアセトニトリル(AN, 分子体積: 60.5 Å³)を添加し、Li イオン溶媒和の構造操作を施したところ、Li イオンに配位した FSA アニオンの配位形態が変化することを引き金として電極反応特性が大幅に向上することを見出した。これに対して、超濃厚電解液系では希薄系と大きく異なり、特に、(1)AN 添加による構造操作を行うことで、アニオンを介して Li イオンが秩序化した特殊な多核錯体を形成すること(Fig.3)、(2)この特殊構造 (バルク) が電極反応特性と直結しており、実際に、電極反応の反応場となる電極界面構造がバルクの特異構造と密接に連動していることを指摘した[4]。種々の Li 塩/溶媒ペアからなる超濃厚電解液に対して系統的に Li イオン周りの個

別配位数（局所構造）、イオン集合体の長距離秩序性を定量的に評価した結果、対アニオンを介して多核化した Li イオン集合体の構造は溶媒分子の電子対供与性および分子サイズに強く依存することがわかった。また、溶媒の分子サイズが異なる混合系では、溶媒種の混合組成に応じて Li イオン集合体の秩序構造が大きく変化し、これがイオン伝導性や電極反応特性に影響することがわかった[5-7]。さらに、*in-situ* 表面増強赤外分光法により、電極近傍の電解液構造を分子レベルで調べた。電位加印に伴う構造変化過程をその場観察したところ、バルクで形成する Li イオンの集合構造が界面近傍でも部分的に反映されている(バルクと界面の構造連動性)ことが示唆された[4]。また、負極上に形成される不動体皮膜の形成メカニズム、これに及ぼす高濃度化の影響についても知見を得ることができた。

超濃厚電解液の電極反応速度論を明らかにすることを目的として、モデル電極としてグラファイト負極を選択し、超濃厚電解液中における電極反応(リチウムイオンの挿入・脱離反応)の活性化エネルギーを実験的に調べた。溶媒の電子対供与性および Li 塩濃度に着目して系統的に研究を進めたところ、挿入脱離反応の活性化エネルギーは溶媒の電子対供与性に強く依存すること、すなわち、構造秩序化した Li イオンから溶媒分子が脱配位するプロセスが電極反応を速度論的に支配していることがわかった。また、極めて低い電子対供与性を示すフッ素化アセテートを主溶媒とした超濃厚電解液では、従来カーボネート電解液よりも著しく小さい活性化エネルギーを示し(フ

ッ素化アセテート系: 19.9 kJ mol^{-1} , 従来系: 58 kJ mol^{-1} 程度)、実際に、電池電解液として充放電試験を実施したところ、優れた充放電レート特性を示すことがわかった[8,9]。上述の分子レベル構造解析の結果と総合して、グラファイト負極反応 (Li イオンの挿入/脱離反応) のメカニズムを考察し(Fig. 4)、超濃厚系に特有な支配因子を提案した。現在、電極反応の実際の反応場となる電極/電解液界面における MD シミュレーションを進めており、濃厚化が界面特性に及ぼす影響の可視化を試みている。シミュレーションデータを用いて電極近傍のリチウムイオン集合構造を密度分布関数として定量的に表示し、その塩濃度依存性および電位依存性を解析することで、「希薄系と濃厚系」「界面構造とバルク構造」の類似点や相違点を明確に示すことができると考えている。

本研究課題において、超濃厚電解液中の Li イオンの溶存構造について系統的研究を進めた結果、Li イオン周りの個別配位数や構造秩序性に与える溶媒種や溶媒構造、塩濃度の効果についておおよその傾向を把握することができた。また、濃厚電解液の構造-物性相関、例えば、Li イオンの構造秩序性の程度と電極反応メカニズムの間に相関があることが明らかとなり、電池特性を制御する上での指標となることがわかってきた。バルク構造と電極界面の連動性についても知見が得られてきており、今後のさらなる展開が期待できる。

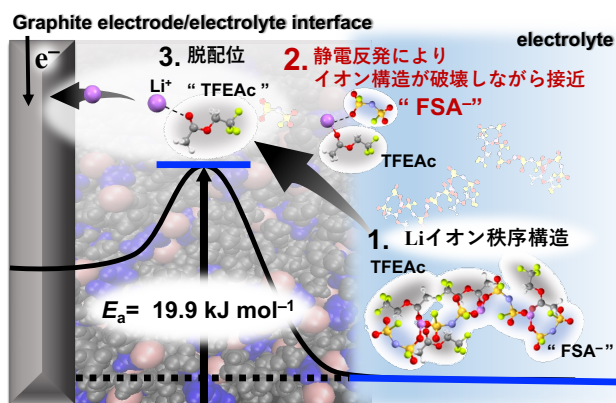


Fig. 4 Graphite electrode reaction mechanism at electrode/electrolyte interface for highly concentrated LiFSA/TFEAc system.

- [1] Y. Yamada, K. Furukawa, K. Sodeyama, K. Kikuchi, M. Yaegashi, Y. Tateyama and A. Yamada, *J. Am. Chem. Soc.*, **136**, 5039-5046 (2014).
- [2] K. Sodeyama, Y. Yamada, K. Aikawa, A. Yamada and Y. Tateyama, *J. Phys. Chem. C*, **118**, 14091-14097 (2014).
- [3] K. Fujii, M. Matsugami, K. Ueno, K. Ohara, M. Sogawa, T. Utsunomiya and M. Morita, *J. Phys. Chem. C*, **121**, 22720-22726 (2017).
- [4] S. Sawayama, A. Morinaga, H. Mimura, M. Morita, Y. Katayama and K. Fujii, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **13**, 6201-6207 (2021).
- [5] K. Shigenobu, M. Shibata, K. Dokko, M. Watanabe, K. Fujii and K. Ueno, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **23**, 2622-2629 (2021).
- [6] J. Han, M. Osugi, N. Ikeda and K. Fujii, *Polymer*, **262**, 125426 (2022).
- [7] K. Suzuki, S. Sawayama, Y. Deguchi, R. Sai, J. Han and K. Fujii, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **24**, 27321-27327 (2022).
- [8] S. Sawayama, R. Ochi, H. Mimura, M. Morita and K. Fujii, *J. Phys. Chem. C*, **125**, 27098-27105 (2021).
- [9] S. Sawayama, R. Ochi, T. Kawaguchi, Y. Katayama, M. Morita and K. Fujii, *ACS Appl. Energy Mater.*, **6**, 989-996 (2023).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計16件（うち査読付論文 16件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Sawayama Saki, Ochi Riko, Kawaguchi Tsubasa, Katayama Yu, Morita Masayuki, Fujii Kenta	4. 巻 6
2. 論文標題 Effect of a Weak Coordination Solvent on a Kinetically Favorable Electrode Reaction in Concentrated Lithium-Ion Battery Electrolytes	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 ACS Applied Energy Materials	6. 最初と最後の頁 989 ~ 996
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsaem.2c03446	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 Suzuki Kenzo, Sawayama Saki, Deguchi Yuna, Sai Ryansu, Han Jihae, Fujii Kenta	4. 巻 24
2. 論文標題 A structural and electrochemical study of lithium-ion battery electrolytes using an ethylene sulfite solvent: from dilute to concentrated solutions	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 27321 ~ 27327
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2CP03616A	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 Han Jihae, Osugi Mayu, Ikeda Namie, Fujii Kenta	4. 巻 262
2. 論文標題 Lithium salt-concentrated organogels prepared via one-step polymer network formation in acetonitrile-based solutions	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Polymer	6. 最初と最後の頁 125426 ~ 125426
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.polymer.2022.125426	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 Shibata Masayuki, Sawayama Saki, Osugi Mayu, Fujii Kenta	4. 巻 366
2. 論文標題 Structural aspect on "Salting-in" mechanism of PEG chains into a phosphonium-based ionic liquid using lithium salt	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Molecular Liquids	6. 最初と最後の頁 120255 ~ 120255
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.molliq.2022.120255	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 Chikaoka Yu, Ochi Riko, Fujii Kenta, Ariga Takaaki, Sakurai Masato, Matsumoto Ayuna, Ueda Tsukasa, Iwama Etsuro, Naoi Katsuhiko	4. 巻 126
2. 論文標題 Controlling the Phase Separation of Dimethyl Carbonate Solvents Using a Dual-Cation System: Applications in High-Power Lithium Ion-Based Hybrid Capacitors	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 14389 ~ 14398
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.2c03004	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 Ikeda Namie, Ishikawa Asumi, Fujii Kenta	4. 巻 24
2. 論文標題 Polyether-based solid electrolytes with a homogeneous polymer network: effect of the salt concentration on the Li-ion coordination structure	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 9626 ~ 9633
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d1cp05351e	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 Takano Saori, Sawayama Saki, Han Jihae, Fujii Kenta	4. 巻 51
2. 論文標題 A Homogeneous Polymer Network Organogel Prepared in Concentrated Lithium-ion Battery Electrolytes Using a Nonflammable Fluorinated Solvent	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 412 ~ 415
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/cl.210815	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 Sawayama Saki, Ochi Riko, Mimura Hideyuki, Morita Masayuki, Fujii Kenta	4. 巻 125
2. 論文標題 2,2,2-Trifluoroethyl Acetate as an Electrolyte Solvent for Lithium-Ion Batteries: Effect of Weak Solvation on Electrochemical and Structural Characteristics	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 27098 ~ 27105
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c07312	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, Nozaki Erika, Han Jihae, Fujii Kenta, Ikeda Kazutaka, Otomo Toshiya, Ueno Kazuhide, Dokko Kaoru, Watanabe Masayoshi, Kameda Yasuo, Umebayashi Yasuhiro	4. 巻 125
2. 論文標題 Local Structure of Li ⁺ in Superconcentrated Aqueous LiTFSI Solutions	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 7477 ~ 7484
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c04693	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 Han Jihae, Takano Saori, Fujii Kenta	4. 巻 50
2. 論文標題 Tetra-arm Poly(ethylene glycol)-based Ion Gels with Controlled Polymer Network Defects: Application to Lithium-ion Battery Gel Electrolytes	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 1508 ~ 1511
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/cl.210235	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 Sawayama Saki, Morinaga Asuka, Mimura Hideyuki, Morita Masayuki, Katayama Yu, Fujii Kenta	4. 巻 13
2. 論文標題 Fluorophosphate-Based Nonflammable Concentrated Electrolytes with a Designed Lithium-Ion-Ordered Structure: Relationship between the Bulk Electrolyte and Electrode Interface Structures	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Applied Materials & Interfaces	6. 最初と最後の頁 6201 ~ 6207
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsmi.0c19293	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, 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 Kameda Yasuo, Saito Shu, Saji Aoi, Amo Yuko, Usuki Takeshi, Watanabe Hikari, Arai Nana, Umebayashi Yasuhiro, Fujii Kenta, Ueno Kazuhide, Ikeda Kazutaka, Otomo Toshiya	4. 巻 124
2. 論文標題 Solvation Structure of Li ⁺ in Concentrated Acetonitrile and N,N-Dimethylformamide Solutions Studied by Neutron Diffraction with ⁶ Li/ ⁷ Li Isotopic Substitution Methods	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 10456 ~ 10464
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.0c08021	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 Sakamoto Ryo, Yamashita Maho, Nakamoto Kosuke, Zhou Yongquan, Yoshimoto Nobuko, Fujii Kenta, Yamaguchi Toshio, Kitajou Ayuko, Okada Shigeto	4. 巻 22
2. 論文標題 Local structure of a highly concentrated NaClO ₄ aqueous solution-type electrolyte for sodium ion batteries	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 26452 ~ 26458
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d0cp04376a	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 Matsuoka Riho, Shibata Masayuki, Matsuo Kousuke, Sai Ryansu, Tsutsumi Hiromori, Fujii Kenta, Katayama Yu	4. 巻 53
2. 論文標題 Importance of Lithium Coordination Structure to Lithium-Ion Transport in Polyether Electrolytes with Cyanoethoxy Side Chains: An Experimental and Theoretical Approach	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Macromolecules	6. 最初と最後の頁 9480 ~ 9490
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.macromol.0c01634	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 Ohkubo Kota, Yanagisawa Keiya, Kamimura Akio, Fujii Kenta	4. 巻 124
2. 論文標題 Physicochemical and Structural Properties of a Hydrophobicity/Hydrophilicity Switchable Ionic Liquid	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 3784 ~ 3790
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.0c02067	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12件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 0件）

1. 発表者名 川口 翼, 大杉茉由, 藤井健太
2. 発表標題 FSA型イオン液体を溶媒とする超濃厚LiFSA電解液の溶液構造解析および電極反応特性
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 藤田小雪, 藤井健太
2. 発表標題 金属イオン錯形成により架橋する四分岐高分子を用いた超濃厚電解液のゲル化メカニズムと電解質特性
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 江原寧々, 上野和英, 藤井健太
2. 発表標題 ケトエステル系超濃厚電解液の溶液構造解析：分子コンフォメーション変化とイオン秩序構造形成
3. 学会等名 日本分析化学会第70年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 越智梨瑚, 三村英之, 藤井健太
2. 発表標題 フッ素化アセテート溶媒を用いた超濃厚電解液の精密溶液構造解析と電気化学的特性
3. 学会等名 第81回分析化学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 越智梨瑚, 三村英之, 片山 祐, 藤井健太
2. 発表標題 低配位性溶媒を用いた超濃厚電解液のバルクおよび電極界面構造
3. 学会等名 第58回化学関連支部合同九州大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 松浦沙樹, 柴田雅之, 韓 智海, 藤井健太
2. 発表標題 ホスホニウム型イオン液体を溶媒とする均一網目ゲル電解質の物性および電気化学特性
3. 学会等名 第69回高分子学会年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 石川明日美, 藤井健太
2. 発表標題 Liイオン電池用イオン液体ゲル電解質の網目構造制御とイオン輸送特性
3. 学会等名 第69回高分子学会年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 澤山沙希, 森永明日香, 片山 祐, 三村英之, 藤井健太
2. 発表標題 Liイオン電池用不燃性超濃厚電解液のバルク構造と電極/電解液界面構造への影響
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 高野沙織, 松浦沙樹, 韓 智海, 藤井健太
2. 発表標題 フッ素化リン酸エステル溶媒を用いた不燃性ゲル電解質のゲル化反応メカニズムと電気化学特性
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 澤山沙希, 森永明日香, 片山 祐, 三村英之, 森田昌行, 藤井健太
2. 発表標題 低配位性溶媒を用いたLiイオン電池用超濃厚電解液のバルク構造と電極/電解液界面構造への影響
3. 学会等名 第61回電池討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 越智梨瑚, 三村英之, 藤井健太
2. 発表標題 2,2,2-trifluoroethyl acetate を溶媒とする超濃厚電解液の溶液構造と電気化学特性
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 江原寧々, 上野和英, 藤井健太
2. 発表標題 ケトエステル系溶媒を用いた超濃厚LiFSA電解液の分子レベル構造解析
3. 学会等名 電気化学会第88回大会
4. 発表年 2021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 分担者	松上 優 (Matsugami Masaru) (50455177)	熊本高等専門学校・リベラルアーツ系理数グループ・准教授 (57403)	
研究 分担者	片山 祐 (Katayama Yu) (70819284)	大阪大学・産業科学研究所・准教授 (14401)	

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