

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）（基盤研究（S））中間評価

課題番号	20H05673	研究期間	令和2(2020)年度 ～令和6(2024)年度
研究課題名	孤立分子・孤立軌道の特異性に基 づく蓄電材料機能の革新	研究代表者 (所属・職) (令和4年3月現在)	山田 淳夫 (東京大学・大学院工学系研究科 (工学部)・教授)

【令和4(2022)年度 中間評価結果】

評価	評価基準	
	A+	想定を超える研究の進展があり、期待以上の成果が見込まれる
○	A	順調に研究が進展しており、期待どおりの成果が見込まれる
	A-	概ね順調に研究が進展しており、一定の成果が見込まれるが、一部に遅れ等が認められるため、今後努力が必要である
	B	研究が遅れており、今後一層の努力が必要である
	C	研究が遅れ、研究成果が見込まれないため、研究経費の減額又は研究の中止が適当である
(研究の概要)		
<p>同一分子間相互作用や軌道相互作用から解放された孤立分子や電子の孤立軌道を、一般的かつ合理的な合成手法を用いて液体中・固体中に高密度に導入し、これらが秘める未知の電気化学超機能（高電圧駆動、高密度蓄電、長期安定性等）を有機電解液、アクア電解液、固体電極材料、及び固液界面において抽出し最大化する。機能限界を徹底的に追い込むことで高エネルギー密度、高出力、長寿命な次世代蓄電池の開発を強力に加速する。</p>		
(意見等)		
<p>本研究は当初の計画どおりに進行しており、その進捗は順調である。これは、注目度の高い学術雑誌に発表された研究成果からも明らかである。</p> <p>当初の計画のとおり、電解液中、ナノ空間中、及び、電極中に孤立分子や孤立軌道を導入してバルク集合体と比較して高い（あるいは異常な）化学ポテンシャルを実現しており、これがバルクとは異なるレドックス準位やその結果としての広い電位窓などのマクロな熱力学的性質を実現している。これらの結果は、当初掲げた学術的「問い」にある孤立したイオンによるバルクやナノサイズ効果をはるかに超える新規な孤立イオン特性のマクロ的性質に反映させる具体例を示すことに成功している。このコンセプトを電解液や正極、負極に応用して、高電圧、高容量、長寿命を実現する蓄電池の構成に成功していることなど、応用を出口とした目標も達成している。当初想定した孤立イオンの特異な電子構造に関する様々な仮説を実証して電位窓の拡大につなげている点は高く評価できる。</p>		