

2019年度 MERIT インターンシップ（国内）報告書

MERIT7 期生

新領域創成科学研究科 物質系専攻

木村（薫）研究室 博士課程一年 岩崎祐昂

受け入れ先企業：株式会社日産アーク 解析プラットフォーム開発部 デバイス解析室
計算科学・インフォマティクスチーム

実習期間：令和元年9月16日～令和元年11月15日

実施テーマ：表面・界面系の DFT

目的： 本インターンシップの受け入れ企業である株式会社日産アークは、計算物質科学に関して高い技術力を持っており、第一原理計算に基づいた電気化学界面系の解析技術をリチウムイオン電池材料に適用し、いくつもの成果を挙げている。そこで、日産アークでの2ヶ月のインターンシップを通して、第一原理計算を用いた大規模系の解析技術を習得し、計算物質科学に対する深い知見を得ること、民間企業の研究スタイルを経験し学ぶことを目的とした。

研究内容と結果：

リチウムイオン電池(LIB)は、スマートフォン等の電子デバイスだけでなく電気自動車への実装もされている IoT 社会を担う重要な機能性材料である。しかし、電気自動車によく用いられている LIB 正極材料の LiMn_2O_4 における Mn の電解質への溶出は電池の劣化要因の一つとして知られている。よって、電池の長寿命化のためには Mn の溶出を抑制する手法の確立が望まれる。

本研究では、電極を DFT、電解質を古典溶液理論で扱う ESM-RISM(Effective screening medium – Reference interaction site model)法を用いて、LIB の正極・電解質界面の微視的シミュレーションを行い、正極中の Mn が電解質へ溶出するメカニズムの解析・及び溶出抑制の指針を考察した。

まず、正極材表面のモデルを日産アークの所有している Materials Studio を用いて作成し、ESM-RISM 法の実装された DFT パッケージ PWscf で社内大型計算機を用いて計算・解析を行った。電解質は LiPF_6 とエチレンカーボネート(EC)分子をそれぞれ 1M の濃度で導入した。ここで ESM-RISM 法では電極電位(電子の化学ポテンシャル)を任意の値に設定できる constant- μ 法が実装されているため、電極と電解質の化学ポテンシャルが等しくなる平衡状態での反応や、電極の表面電荷が 0 となる反応が再現でき、

溶出イオンの活性障壁や電荷移動を考察した。

正極材から Mn が溶出する過程をシミュレーションした結果、溶出した Mn が 2 価のイオンになることが分かった。また、溶出過程のグラウンドポテンシャルをプロットすると、Mn 溶出に伴う活性化障壁が 2 つ確認された。これらの活性化障壁の起源を調べるために、収束した電子構造から RISM の分布を解析した。その結果、一つ目の障壁は八面体配位している酸素による立体障壁であり、二つ目の障壁は電極表面に誘起された電気二重層に起因する立体障壁であることが分かった。

所感：

今回のインターンシップを通して、上述した目的は達成できたと感じている。特に私が与えられた課題の対象物質は、考慮しなければならない条件が多く、計算の収束が非常に困難な系であった。そのため、思うように結果が出せず頭を悩ませていたが、ポジティブに考えてみれば、今までは目を通すことのなかったような条件を初心に立ち返って一つ一つ再考できたので、計算科学の知識・スキルは大幅に向上できたと考えている。また、実力のある同じチームの人たちとの議論は非常に有意義なものであり、度々勉強させていただいた。課題に臨むにあたり、色々と手を広げ過ぎてしまった場合には、優先順位を決めて重要な結果が出そうなものから進めるように諭されることなどもあり、短期間での成果を求められる企業の研究職特有のスピード感も感じられた。私は、人に聞くよりもまずやれるところまでやってみてから報告するスタイルを貫いてきたので、実行する前に相談するスタイルには新鮮さがあり、効率よく業務を行う戦略はこれからの自分の研究を進める上でも役に立つと感じられた。

謝辞：

二ヶ月にわたるインターンシップ期間中、株式会社日産アークの大脇様、石野様、池庄司様をはじめとする方々には大変お世話になりました。また、受け入れ先の紹介や、実施期間中の宿泊先の調整などに尽力して下さった計算物質科学人材育成コンソーシアム(PCoMS) 事務局にも大変感謝しております。普通の博士課程では経験できないような機会を設けて頂いた統合物質科学リーダー養成プログラム (MERIT) にも感謝しております。最後になりましたが、二ヶ月間のインターンシップを快諾して下さった指導教員の木村先生には深く感謝いたします。