

液相エナジェティクスに基づく蓄電科学の再構築

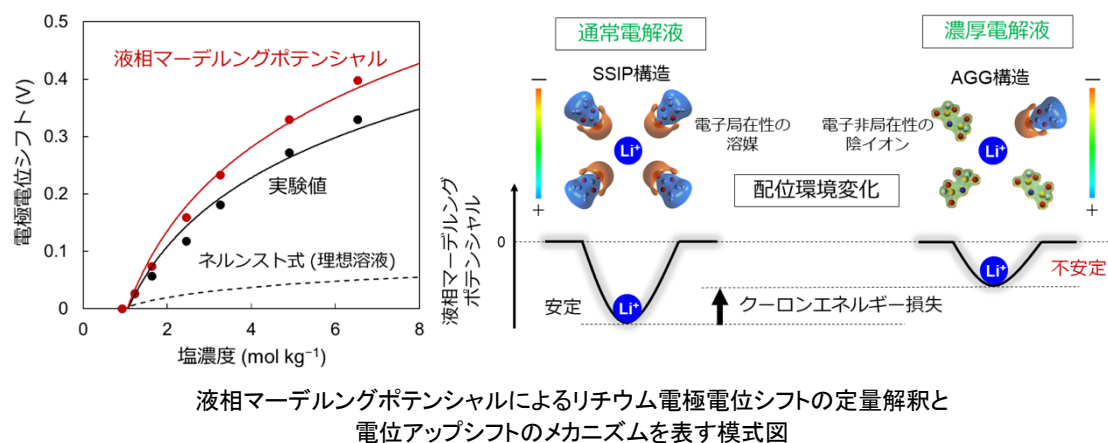
(東大院工) ○山田 淳夫

Redefining Battery Science Based on Electrolyte Energetics (*Graduate School of Engineering, The University of Tokyo*), ○Atsuo Yamada

We show that the “*liquid Madelung potential*” (E_{LM}) based on the conventional explicit treatment of solid-state Coulombic interactions enables quantitatively accurate expression of the electrode potential, with the E_{LM} shift obtained from molecular dynamics reproducing a hitherto-unexplained huge experimental shift for several electrode^{1),2)}. Thus, a long-awaited method for description of the electrode potential in any electrochemical system is now available³⁾.

Keywords : *Electrode Potential; Liquid Madelung Potential; Debye-Hückel Theory*

凝集系としての“固液共通性”に対する俯瞰を通じて到達した上位概念「液相マードルングポテンシャル」は、従来の電気化学理論で説明困難な巨大な電極電位シフトに明確な定量性を与えた^{1),2)}。希薄系においてのみ成立していた、1923年に P. Debye と E. Hückel により提唱された理論 (Debye-Hückel 理論) に代わる新理論体系に基づき、電池システム全体のポテンシャルダイアグラムを最適化した例を紹介する³⁾。



- 1) 階層機械学習による電極電位の影響因子解析と液相マードルングポテンシャルによる定量解釈, 竹中規雄, Ko Seongjae, 北田敦, 山田淳夫, 電気化学会誌, **2023**, 91, 140
- 2) Liquid Madelung Energy Accounts for the Huge Potential Shift in Electrochemical Systems. N. Takenaka, S. Ko, A. Kitada, A. Yamada, *Nature. Comm.* **2024**, <https://doi.org/10.1038/s41467-023-44582-4>
- 3) Electrolyte Design for Lithium-ion Batteries with a Cobalt-free Cathode and Silicon Oxide Anode. S. Ko, X. Han, T. Shimada, N. Takenaka, Y. Yamada, A. Yamada, *Nature Sustain.* **2023**, <https://doi.org/10.1038/s41893-023-01237-y>