

2種類の有機物を混ぜることで、リチウムイオン電池の特性を劇的に向上する手法を開発

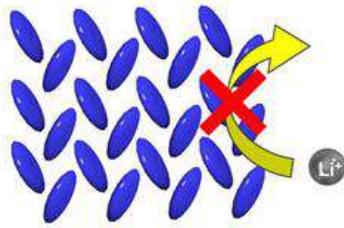
関西学院大学と大阪大学の研究チームは、有機物を電極材料として用いたリチウムイオン電池で、2種類の有機分子を混ぜ合わせた電極材料の特性が、それぞれの分子を単一で用いた場合に比べて劇的に向上することを見いだしました。

リチウムイオン電池は、圧倒的に高いエネルギー密度を示すことからスマートフォンなどの各種デバイスに広く使われています。しかしながら、一般にリチウムイオン電池の正極材料にはコバルトなどの希少金属を用いた材料が使われており、より安価な有機物を用いた電極材料が広く探索されています。

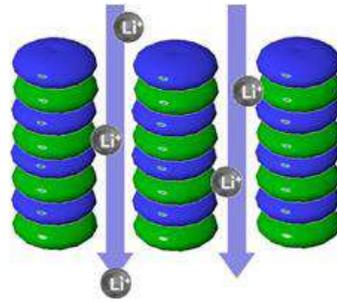
現在、数多くの有機材料が正極材料の候補として検討されていますが、本研究チームは、単一では低い特性しか示さない2種類の有機分子を1:1で混ぜることで、電極材料としての特性を劇的に向上させることに成功しました。これは、2種類の分子を混ぜ合わせることで、リチウムイオンが出入りできる「隙間」を合理的に作り出すことができるためであると考えられます。また、2種類の有機物を混ぜ合わせることで、材料の安定性も向上することを見出しました。

今回、研究チームは、リチウムイオン電池の電極材料として、中心に正の電荷を持つ円盤状の有機分子と負の電荷を持つ円盤状の有機分子2種類の有機分子を混ぜ合わせた電荷移動錯体と呼ばれる材料を開発し、その特性が単一の有機分子と比較すると劇的に向上することを見いだしました。

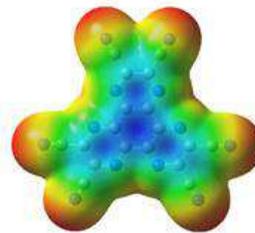
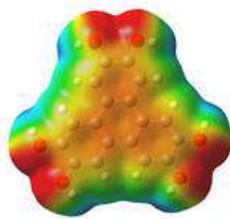
これは、有機分子が集積した結晶の中に、リチウムイオンが拡散する通路ができたためだと考えられます。図1に示すように単一の有機分子を用いた場合は、分子同士の電荷が反発して密に詰まった構造をとることが知られています。一方、本研究では、異なる符号の電荷を持った分子を1:1で混ぜることで、2種類の円盤状分子が交互に積み上がった筒状の構造を形成し、筒と筒の隙間にさまざまな分子を取り込むことができるようになることを明らかにしました。さらに、電荷移動錯体が持つこの隙間を利用することで、高速でリチウムイオンが出入りする高い容量を持った電極材料を開発することに成功しました。



1種類の分子のみを用いた場合
リチウムイオンが入れない



2種類の分子を組み合わせると
リチウムイオンの通り道ができる



本研究で用いた2種類の有機分子の電荷分布

図1 2種類の分子が作る隙間の様子と、分子が持つ電荷の分布。正の電荷が青で、負の電荷が赤で示されている。分子の中心の電荷が逆になっていることが分かる。

また、正負の電荷間の強い相互作用により、この電荷移動錯体の電解液への溶解が抑制されていることも確認されました。大阪大学の計算機を用いた共同研究により、この相互作用のエネルギーを見積もることにも成功しています。

低い電極特性しか示さなかった有機物2種類を単純に混ぜるだけで特性が劇的に向上することを実証した本成果は、これまで特性が悪いと思われていた有機分子でも、優れた電極材料として活用することが可能であることを実証した、新しい手法として広く活用されることが期待されます。

本研究成果は、2019年11月30日に英国王立化学会発行の科学誌「Chemical Science」オンライン版に掲載されます。

<論文情報>

タイトル “A new design strategy for redox-active molecular assemblies with crystalline porous structures for lithium-ion batteries”

DOI : 10.1039/C9SC04175C

日文新闻发布全文 <https://www.ist.go.jp/pr/announce/20191:130/index.html>

文：JST 客观日本编辑部翻译整理