

Title	多価カチオン二次電池正極材料の反応機構解明
Author(s)	森, 拓弥
Citation	京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 (2014), 2013: 122-123
Issue Date	2014-03
URL	http://hdl.handle.net/2433/186356
Right	
Type	Article
Textversion	publisher

多価カチオン二次電池正極材料の反応機構解明

Reaction mechanisms of the cathode material in multivalent cation batteries

人間・環境学研究科 相関環境学専攻 森 拓弥

近年、エネルギー問題に対する関心の高まりとともに、蓄電池への注目が高まっている。蓄電池は、現在小型電子機器での利用が中心となっているが、今後、自動車や工場などで使用するために、さらに高容量の蓄電池の開発が強く求められている。電気自動車用蓄電池では 500 whkg^{-1} 以上という非常に大きなエネルギー密度が必要であるという試算もあり、また現在主に用いられている蓄電池であるリチウムイオン二次電池の材料の資源・安全面の問題から、リチウムイオン二次電池を凌ぐ性能・特性を有するポストリチウムイオン二次電池の開発が求められている。その中で、多価カチオン二次電池は、高容量であることから、リチウムイオン二次電池を超える次世代の二次電池として注目されている。特に、マグネシウムイオンをキャリアイオンとして用いるマグネシウムイオン二次電池は、マグネシウムの比較的卑な酸化還元電位 (-2.38 V VS SHE)、高い比重量容量 (2205 mAhg^{-1})、体積容量 (3837 mAhcm^{-3}) などから、高エネルギー密度化が可能であり、将来的な実用化が期待されている蓄電池である。また、マグネシウムはリチウムと比較して、資源が豊富、高融点といった特長があり、低コスト化かつ高い安全性が見込める。このような利点からマグネシウムイオン二次電池はポストリチウムイオン電池として高い注目を集めている。

マグネシウムイオン二次電池の開発において最も大きな問題として、電解液が挙げられる。マグネシウムイオン二次電池で使用できる電解液は、グリニャール試薬を用いた電解液などが見出されている¹が、安全性に問題があり、工業的実用化は不可能であると考えられている。そのため、マグネシウムイオン二次電池において、実用的に用いることが電解液は未だ開発されておらず、実用化への大きな妨げとなっている。当研究グループでは、安全性を備え、かつ、マグネシウムイオン二次電池で充放電可能な電解液の開発を進めている。しかし、トライアンドエラーの実験を続け、無作為に新規な電解液を探索することは非常に困難であると考えている。そこで本研究では、マグネシウムイオン二次電池で使用できる可能性がある電解液中の分子構造を計算科学的に明らかとして、充放電特性との関連を考察することで、マグネシウムイオン二次電池で使用可能な電解液の分子構造の法則を見出すことを目的としている。

まず、マグネシウムイオンの充放電が可能である既報の電解液であるグリニャール試薬を用いた電解液 ($\text{Mg}(\text{AlCl}_2\text{EtBt})_2$ のテトラヒドロフラン溶液)¹の溶液内構造を明らかにすることから検討を始めた。マグネシウムイオンの充放電が可能な電解液では、マグネシウムイオンが二核錯体を形成しているという提案²があり、その提案の妥当性から検討している。現在、 $\text{Mg}(\text{AlCl}_2\text{EtBt})_2$ のテトラヒドロフラン中における分子構造、および溶媒和構造について、構造最適化を進めている。構造決定後、電子状態の検討、および、新規な電解液での構造、電子状態の検討を進める予定である。

參考論文

- [1] D. Aurbach, Z. Lu, A. Schechter, Y. Gofer, H. Gizbar, R. Turgeman, Y. Cohen, M. Moshkovich, E. Levi, *Nature*, **407**, 6805 (2000).
- [2] D. Aurbach, R. Turgeman, O. Chusid, Y. Gofer, *Electrochem. Comm.* **3**, 252, (2001).