

蓄電池材料の構造と物性

Structure and Physical Properties of Materials for Rechargeable Batteries

産官学連携本部 湊 丈俊

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、蓄電池の電極や電解液に用いる材料構造と物性を解析する研究を行った。近年、環境・エネルギーの観点から蓄電池への興味が高まっている。リチウムイオン電池は高いエネルギー密度を有し、現在最も普及した蓄電池として小型電子機器などに広く使用されている。更に、電気自動車や再生可能エネルギーの貯蔵などその利用が拡大するに従って、電池性能の更なる向上が強く望まれている。蓄電池において、電極と電解液の界面の物性および反応は性能に大きな影響を与える(参考文献1)が、不明な点があり未だ多くを想像に頼っている。本研究課題では、リチウムイオン電池の電極として用いられる炭素と電解液の溶媒の界面構造を液中動作周波数変調原子間力顕微鏡で直接観察し、その構造を密度汎関数計算で解析した。その結果、溶媒分子が炭素上で超構造を形成し安定に吸着する様子を明らかにした(発表論文1)。

また、コンバージョン反応を進行するフッ化物系の活物質は、充放電反応中にフッ化物相と金属相の2相が混在する状態を形成する。本研究課題では、この2層界面の安定性について密度汎関数で計算し、2相界面が形成されるとフッ化物相と金属相が乖離する傾向があることを明らかとした(発表論文2)

さらに、リチウムイオン電池に比べ非常に高いエネルギー密度を有すると期待される革新型蓄電池として「フッ化物シャトル二次電池」という新しい電池の開発に取り組み、電解液への添加物とフッ化物イオンとの相互作用を密度汎関数で解析した。その結果、添加物がフッ化物イオンと安定構造を形成することを明らかとした(発表論文3)。

発表論文(謝辞あり)

- [1] Taketoshi Minato, Yuki Araki, Kenichi Umeda, Toshiro Yamanaka, Ken-ichi Okazaki, Hiroshi Onishi, Takeshi Abe, Zempachi Ogumi, Interface Structure Between Tetraglyme and Graphite, *J. Chem. Phys.* **147**, 124701 (2017).
- [2] Hiroaki Konishi, Taketoshi Minato, Takeshi Abe, and Zempachi Ogumi, Difference of Rate Performance Between Discharge and Charge Reactions for Bismuth Fluoride Electrode in Lithium-ion Battery, *J. Electroanal. Chem.* **806**, 82-87 (2017).
- [3] Hiroaki Konishi, Taketoshi Minato, Takeshi Abe, and Zempachi Ogumi, Electrochemical Performance of a Bismuth Fluoride Electrode in a Reserve-type Fluoride Shuttle Battery, *J. Electrochem. Soc.* **164**, A3702-A3708 (2017).

参考論文

- [1] Taketoshi Minato and Takeshi Abe, Surface and Interface Sciences of Li-ion Batteries -Research Progress in Electrode-Electrolyte Interface-, *Prog. Surf. Sci.*, **92**, 240-280 (2017).