

エネルギー機能材料の電子構造と光物性

Electronic states and optical properties of the functional energy materials

京都大学 大学院エネルギー科学研究科 エネルギー基礎科学専攻
量子エネルギープロセス分野 蜂谷 寛

研究成果概要

省エネルギー分野で注目され究極のワイドギャップ半導体とされるダイヤモンドに関する実験及びデータ解析を行った [1]。また、電気化学的安定性と高いイオン電導性を持ち、リチウムイオン電池の電解質として注目されるイオン液体についてのラマン散乱、動的ラマン散乱(DLS)の分光実験と、Gaussian16, GAMESS による密度汎関数法(DFT)およびGromacs による分子動力学法 (MD) によるシミュレーションを行った¹。

イオン液体を電池の電解質に利用するにあたり、電荷担体の Li が溶媒和されて拡散に影響を及ぼすことが知られている。そこで、各溶液中の Li の拡散係数が重要となる。本研究では EMITFSI (EMI: 1-ethyl-3-methylimidazolium, TFSI: bis (trifluoromethylsulfonyl) imide) に LiTFSI を添加した系に対し、i) DLS による拡散係数の評価法を確立し、ii) 計算機実験によって溶媒和構造と溶媒和した Li の拡散挙動を明らかにすることを目的とした。Li_xEMI_{1-x}TFSI を作製し、ラマン分光, DFT, MD 計算で Li の溶媒和構造を、DLS 法と MD 法の計算で溶媒和した Li の拡散挙動を検討した。

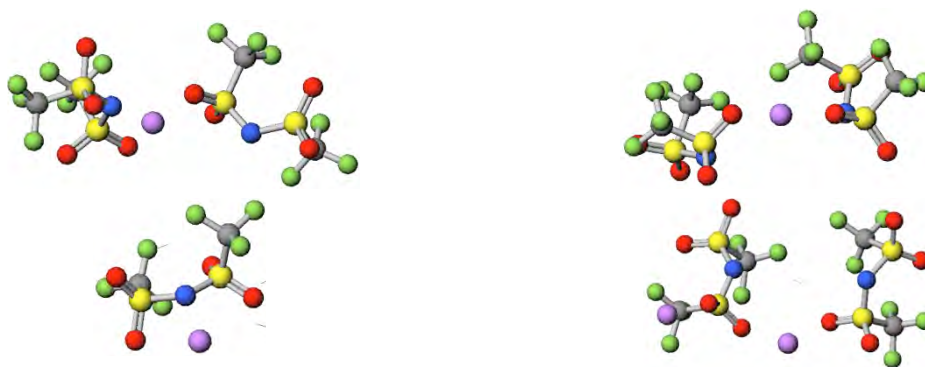


図1 リチウムイオンの特徴的な溶媒和構造 (紫: Li, 青: N, 赤: O, 黄: S, 灰: C, 緑: F)¹

参考文献

¹ 阪口僚、令和3年度修士学位論文 京都大学大学院エネルギー科学研究科 (2022)。

発表論文(謝辞なし)

[1] R. Akasegawa, K. Yoshida, H. Zen, K. Hachiya, T. Goto, T. Sagawa, H. Ohgaki, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **60**, 102001 (2021).