

次世代リチウム電池の大電流を担うリチウムイオンの状態と構造を解明

【発表番号】 D2003

【登録タイトル】 リチウム-グライム錯体系イオン液体中のリチウムイオン局所構造

【一般向け解説概要】

原子力に依存した電力供給体系が見直される中、家庭に設置できる高効率蓄電デバイスとしてリチウム電池の安全性向上と大型化が進められています。次世代リチウム電池のリチウムイオン伝導体として、イオン液体と呼ばれるイオンだけで構成される液体が期待されていますが、リチウムイオンの伝導機構はよくわかっていません。本研究では、リチウムイオン伝導機構を知るうえで重要な鍵を握るリチウムイオンの状態と構造を明らかにしました。これによりリチウムイオン伝導機構が明らかになるだけでなく、次世代リチウム電池開発の課題解決の足がかりになることが期待されます。

【発表者 (○; 登壇者/下線; 連絡担当者)】 ○梅林泰宏

(旧) 九州大学 大学院理学研究院
福岡市東区箱崎 6-10-1
092-642-2582
yumeb@chem.kyushu-univ.jp

(新) 新潟大学 教育研究院自然科学系 数理工学系系列
新潟市西区五十嵐二の町 8050
025-262-6265
yumescc@chem.sc.niigata-u.ac.jp

最近、リチウム塩とトリグライム (G3) やテトラグライム (G4) など鎖状ポリエーテルの等量混合物がイオン液体であり、このリチウム-グライム錯体系イオン液体が、リチウム電池電解質として有用であることが示された。電解質溶液論の立場に立てば、グライムなど多座配位溶媒中の金属イオンの構造と反応性、ダイナミクスは理解が進んでいない。本研究は、リチウム-グライム錯体系イオン液体の構造と輸送特性の関係を分子レベルで明らかにすることを目的として、Raman 分光および X 線散乱実験、ならびに分子軌道計算および分子動力学シミュレーションにより、リチウムイオン局所構造を明らかにした。

リチウム-グライム錯体系イオン液体中では、リチウムイオンが異なるグライム間をホッピングするドミノ式リチウムイオン伝導機構が提案されている。これは、リチウムイオンの溶媒交換反応でもあり、リチウムイオンの局所構造と溶媒交換反応機構、およびリチウムイオン伝導機構の関係が考察された。

