



関西学院大学
KWANSEI GAKUIN UNIVERSITY



関西学院大学
科学技術振興機構

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 -新たな有機電極材料の創出に期待-

報道各位

関西学院大学工学部の清水剛志博士研究員・中島謙介氏・吉川浩史准教授・田中大輔准教授らと大阪大学の北河康隆准教授の研究チームは、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出しました。

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。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、11月30日（日本時間）に総合化学誌「Chemical Science」オンライン版に掲載されました。

《ポイント》

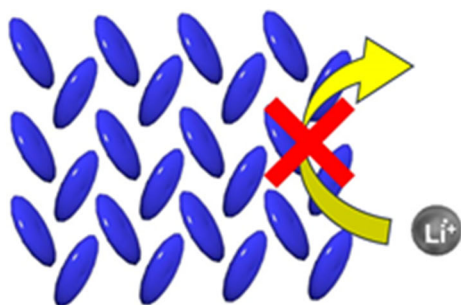
- ・ 2種類の有機物を混ぜ合わせた電極材料を用いたリチウム二次電池では、別々に有機物を用いた場合に比べて劇的に性能が向上することを見出しました。
- ・ これは、有機物を混ぜることで、リチウムイオンが出入りできる隙間を作り出すことができたためであると考えられます。
- ・ 本成果で提案した有機電極材料の開発法を用い、多種多様な有機分子を適切に組み合わせることで、単一の有機物では実現できなかった優れた電極材料の開発に繋がることが期待できます。

《研究の背景と経緯》

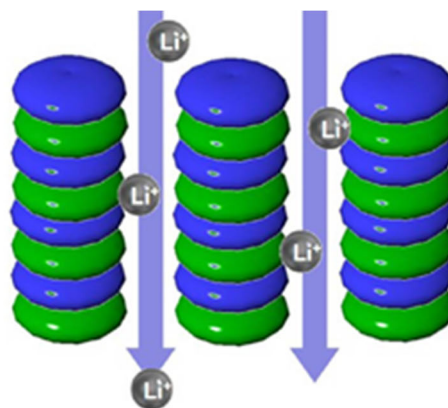
リチウムイオン電池は、本年度の吉野彰博士のノーベル化学賞受賞に代表されるように、現代のIT社会を支える基盤技術として広く認知されています。一方、リチウムイオン電池の正極の材料には希少元素であるコバルトを用いた物質が使われており、高価なコバルトに代わる、より安価で高性能な正極材料が、現在も広く探索されています。特に、有機分子は軽く安価な電極材料として注目されており、様々な有機物が正極材料の候補物質として研究されています。しかしながら、優れた特性が予測される有機物を実際に電極材料として用いた研究では、予想に反して低い電池特性しか示さないことがしばしばおこることが知られています。有機分子の電極材料の研究では有機分子を固体の結晶として用いるのが一般的なのですが、有機物の結晶の内部にリチウムイオンが入り込む隙間を合理的に作り出すことが難しいことと、結晶が電解液に溶け出してしまい安定性が低いという2つの理由が性能低下の原因として挙げられます。優れた電極材料としてのポテンシャルを持った分子の特性を100%引き出すには、有機物の結晶中にリチウムイオンが入ることができる通り道を作り出し、なおかつ材料としての安定性を向上させる汎用性の高い手法の開発が必要です。

《研究成果》

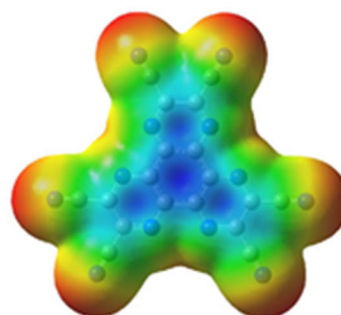
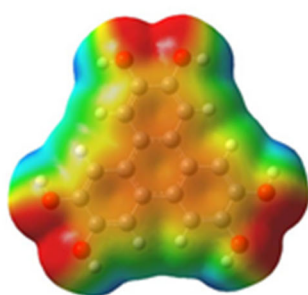
今回、田中准教授と吉川准教授の研究チームは、リチウムイオン電池の電極材料として、中心に正の電荷をもつ円盤状の有機分子と負の電荷をもつ円盤状の有機分子2種類の有機分子を混ぜ合わせた電荷移動錯体と呼ばれる材料を開発し、その特性が単一の有機分子と比較すると劇的に向上することを見出しました。これは、有機分子が集積した結晶の中に、リチウムイオンが拡散する通路ができたためだと考えられます。図に示すように単一の有機分子を用いた場合は、分子同士の電荷が反発して密に詰まった構造をとることが知られています。一方、本研究では、異なる符号の電荷をもった分子を1:1で混ぜることで、二種類の円盤状分子が交互に積み上がった筒状の構造を形成し、筒と筒の隙間に様々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。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。大阪大学の北河康隆准教授と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成功しています。異なる電荷をもつ2種類の分子を混ぜるといふ本手法は、様々な有機分子の組み合わせで応用できるため、これまで高い特性を示さなかった有機分子が本来持っている特性を最大限引き出すことを可能とする新しい手法になるものと期待されます。



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

■参考図■ 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わかる。

《今後の期待》

優れた特性を持つ新しい二次電池が開発されれば、スマートフォンやノートパソコンなどの身の回りのモバイルデバイスの性能を飛躍的に向上させることが可能になります。本研究で開発した技術を活用することで、それまで特性が悪いと思われていた有機分子2種類を混ぜ合わせるだけで、その電極材料としての特性を飛躍的に向上させることが可能になります。一方で、そのような有機分子の組み合わせの数は膨大なものになるため、本研究成果は、広大な「組み合わせによる材料開発」の存在を実証した研究成果であるということが出来るかもしれません。

今後は、このような膨大な数の候補物質を効率的に探索するために、現在発展が著しい人工知能を活用したマテリアルズインフォマティクス (MI) の手法を利用した効率的な材料の開発が期待されます。

■研究助成

本研究は JSPS 科学研究費 (25706005 18H04491 18H04528 16KT0062 17H03048)、JST 戦略的創造研究推進事業 さきがけ「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築 (研究総括: 常行 真司)」における「ハイスループット合成・評価システムと機械学習の統合による革新的太陽電池材料の探索 (研究者: 田中 大輔)」(JPMJPR17NA)、泉科学技術振興財団の支援により行われました。

■論文タイトル

A new design strategy for redox-active molecular assemblies with crystalline porous structures for lithium-ion batteries

(和訳: リチウムイオン電池のための結晶性多孔質構造を持つ酸化還元活性な分子集合体の新しい設計戦略)

■著者

Kensuke Nakashima, Takeshi Shimizu, Yoshinobu Kamakura, Akira Hinokimoto, Yasutaka Kitagawa, Hirofumi Yoshikawa, and Daisuke Tanaka

■Chemical Science 誌のトップページ URL

<https://pubs.rsc.org/en/journals/journalissues/sc>