

計算科学に基づくイオン液体型ソフトマター電解質の 物性チューニングと次世代二次電池応用

大阪大学 大学院基礎工学研究科 近藤 慎司

■ 目的

本研究では、イオン液体型高分子に高濃度のリチウム塩を相溶させた「イオン液体型ソフトマター」を対象に分子動力学計算により、高イオン伝導性を発現する分子要件を明らかにする。

■ 内容

電荷密度の異なる2種のイオン液体型高分子を用いた電解質の配位構造を動的分布関数(RDF)から定量化し、Liイオンの拡散係数と比較する事で、高イオン伝導化に有効な分子設計の指針を得る。

■ 結果

PDADMA FSIでは95%のアニオンがType IIの配位環境をとるのに対し、PDAFF FSIではType IIとType IIIがそれぞれ約45%ずつを占めた。拡散係数の比較から、Type II比率の高い前者の方がLi⁺拡散が速く、共配位構造(Type II)の形成がLi⁺輸送の促進に重要な鍵であることが示唆された。

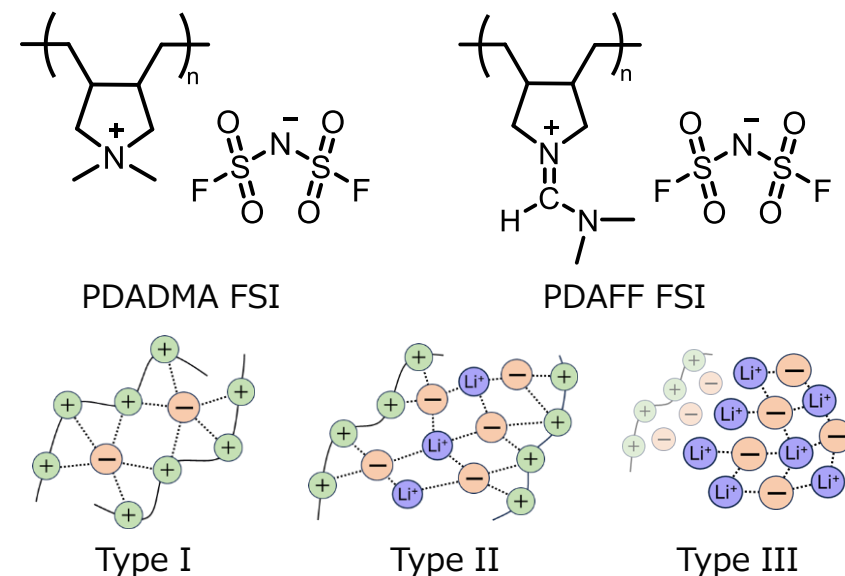


図. 比較を行ったイオン液体型高分子の化学構造とアニオンの配位構造の分類