

原子・分子の自在配列と特性・機能  
2020 年度採択研究者

2021 年度 年次報告書
------------------

山田 裕貴

大阪大学 産業科学研究所  
教授

液体中のイオン・分子配列制御と電気化学新機能の開拓

## § 1. 研究成果の概要

本研究では、液体中におけるイオン・溶媒分子の配列構造化手法の開発と、配列構造化に起因する電解液の新機能の開拓及びデバイス応用を目的とする。

1 つ目の配列構造化の手法として超高濃度化について検討した。超高濃度化の手法は、常温で液体の水和物(水和融体)の状態とすることで、カチオン、対アニオン、水分子に通常の水溶液とは異なる配列構造を作り出し、それに起因する特異な電気化学機能を発現させるという意図がある。2021 年度は、リチウム系超高濃度水系電解液に加えて、ナトリウム系超高濃度水系電解液の検討を行った。リチウム系で高い溶解度を示した非対称構造を有するスルホニルアミドアニオンからなるナトリウム塩 2 種類を特定のモル比で混合することによって、ナトリウム塩二水和融体の調製に成功した。一般に、リチウム塩に対してナトリウム塩の溶解度は低く、常温での二水和融体が得られたのはこれが初めてである。

2 つ目の配列構造化の手法として水分子以外の有機溶媒の特徴に着目した。具体的には、弱配位性溶媒あるいは無極性溶媒を使用し、比較的低濃度でもカチオン-対アニオンのネットワーク構造(高度なイオン会合状態)を形成可能であることが分かった。したがって、非水系電解液の配列構造化の手法として有効であり、各種電気化学機能の発現の可能性がある。

次に、水和融体で既に見いだしている水の電位窓拡張の起源を明らかにすることを目的として、水和融体の構造的特徴について更なる解析を行った。様々な手法を用いた多角的検討により、(1)水分子が孤立し気相に近い状態となっていること、(2)全ての水分子がリチウムイオンに配位していること、(3)これらの特徴により水の活量が 1/10 以下にまで低下していること、(4)リチウムイオン-対アニオンのネットワーク構造が形成されていることなどを明らかにした。