

## X線光電子分光法、ラマン分光法、固体NMR法を用いた 高電位有機正極の分析評価

雁部 祥行

東北大学 多元物質科学研究所 技術室

### 1. はじめに

ポストリチウムイオン二次電池として、資源量やエネルギー密度の観点より有機分子を正極として用いた有機二次電池が注目されている。研究支援先の本間研究室ではこれまでカルボニル系有機正極材料に着目し、官能基修飾カーボン材料と複合化することで3.5V程度の高電位レドックス活性を示すことを見出した<sup>[1]</sup>。この要因を解明するため、X線光電子分光法、ラマン分光法、固体NMR法の複合的な分析化学的アプローチにより有機正極材料の構造評価を行った。本発表では、各種分析手法により得られた有機分子材料及びカーボン材料の局所構造解析結果に関して報告する。

### 2. 実験方法

有機分子としてクロコン酸二ナトリウム塩、カーボン材料としてカルボキシ基修飾カーボンナノチューブを混合、水中で5時間の超音波処理後80°Cで一晩乾燥処理を行い、有機正極材料を作製した。得られた材料を、X線光電子分光分析装置(XPS、アルバック・ファイ製、VersaProbe II<sup>[2]</sup>)、ラマン分光装置(HORIBA製、XploRA)、固体NMR(Bruker製、AVANCE600<sup>[3]</sup>)にて分析評価を実施した。いずれも大気非暴露条件でサンプリング、測定を行った。

### 3. 結果と考察

XPS測定、ラマン分光測定により、クロコン酸二ナトリウム塩分子中のカルボニル基(C=O)に着目した評価を行い、カーボンナノチューブ表面のカルボキシ基と水素結合により相互作用している結果が得られた。また、<sup>1</sup>H-MAS-NMRによりカルボキシ基に含まれる水素の局所構造評価を行い、上述した水素結合を支持する結果が得られた。発表当日は、各種分析結果の詳細と本有機材料が高電位レドックス活性を示した要因に関して報告する。

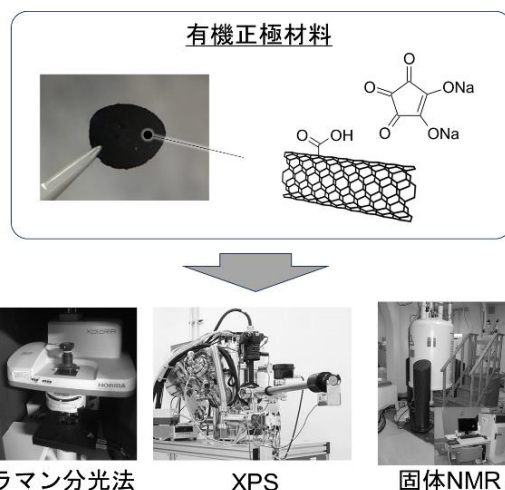


図 本発表の概要

### 4. 参考資料

[1] 雁部 祥行、小林 弘明、本間 格、第63回電池討論会、2022年、講演番号2G10

[2] [https://masc.tohoku.ac.jp/equipment\\_p/about\\_006.html](https://masc.tohoku.ac.jp/equipment_p/about_006.html)

[3] <http://www2.tagen.tohoku.ac.jp/lab/caf/%E5%88%86%E5%AD%90%E6%A7%8B%E9%80%A0%E8%A7%A3%E6%9E%90%E8%A3%85%E7%BD%AE/#tab3>