

量子化学計算によるアゾベンゼン類の電気化学特性評価

電池などに用いられる有機化合物の酸化還元特性・電子状態を予測・評価

測定法 : 計算科学・AI・データ解析

製品分野 : 二次電池

分析目的 : 化学結合状態評価

概要

還元活性を有する芳香族アゾ化合物は、アルカリイオン電池やレドックスフロー電池において現在主力の金属活物質を代替する低環境負荷の次世代有機活物質として注目されています。電池性能の評価には、実験に加えシミュレーションを用いた物質の電子構造や酸化還元特性の検討が有用です。本資料では、量子化学計算によりアゾベンゼンとそのカルボン酸誘導体塩の還元電位、分子軌道計算を行った事例を紹介し、このようにシミュレーションで物質の電気化学特性を推定できます。

データ

■アゾベンゼン(AB)・アゾベンゼン-4,4'-ジカルボン酸二リチウム(Li₂ADA)の還元電位(vs.Li/Li⁺)
(エーテル溶媒のリチウムイオン電池正極を想定)

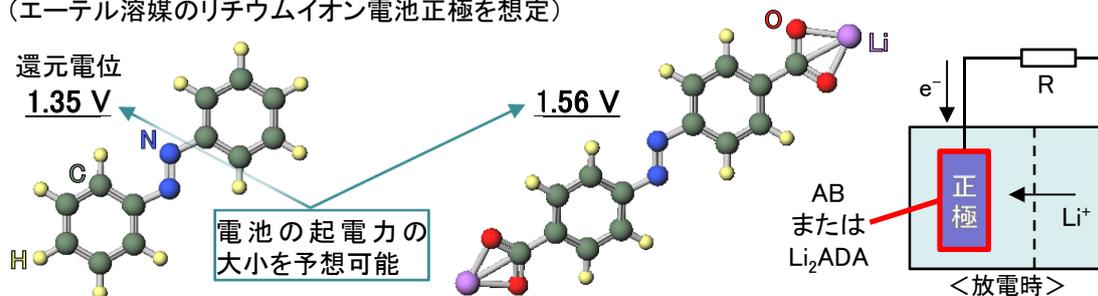


図1 ABとLi₂ADAの分子モデルと想定電池系の模式図

■AB・Li₂ADAの分子軌道に基づく電気的特性の評価

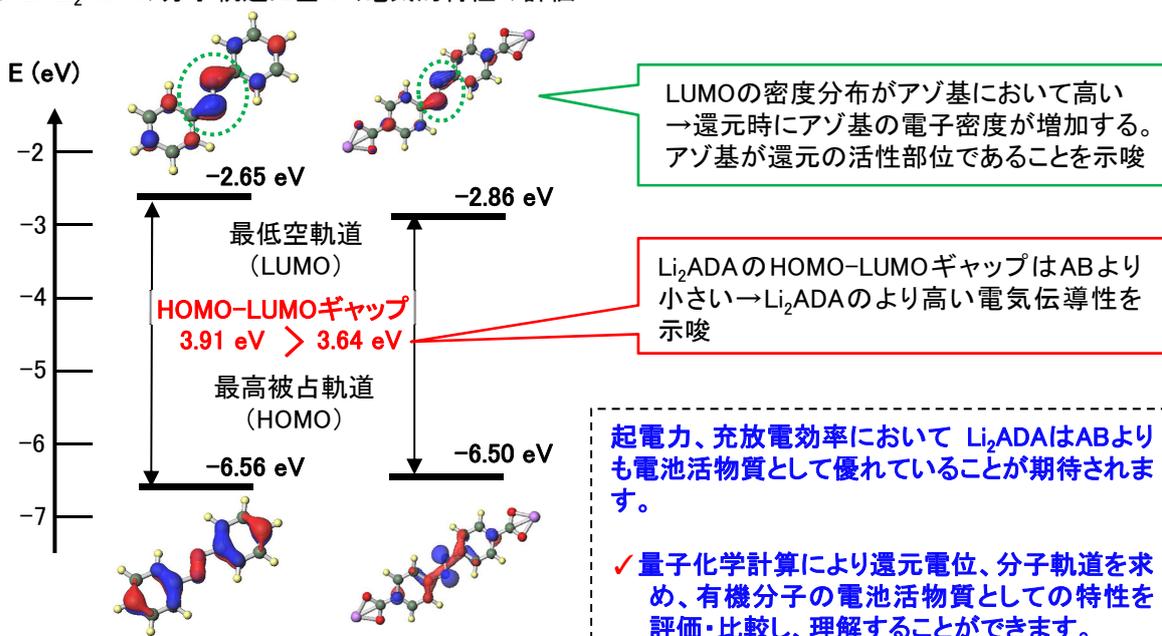


図2 ABとLi₂ADAのフロンティア分子軌道
大きさが電子密度分布に、色が軌道の符号に対応

分析サービスで、あなたの研究開発を強力サポート！

一般財団法人
MST 材料科学技術振興財団

TEL : 03-3749-2525 E-mail : info@mst.or.jp

URL : <https://www.mst.or.jp/>