

令和3年12月1日

報道機関 各位

東北大学 流体科学研究所

リチウムイオン電池の電解液主成分の着火反応を解明 ～発火しない電池の開発に前進～

【発表のポイント】

- ・ リチウムイオン電池の電解液主成分(炭酸エステル)の着火反応を解明。
- ・ 炭酸エステルの統合燃焼反応モデルを世界で初めて構築。
- ・ 電解液主成分の正確な着火限界予測により、発火しない安全なリチウムイオン電池の開発や運用に資することが期待される。

【概要】

リチウムイオン電池の利用が急激に拡大しています。その一方で、リチウムイオン電池の電解液に有機溶媒を使用することに起因するバッテリーの発火事故が問題となっています。

東北大学流体科学研究所の中村寿准教授・丸田薫教授らの研究グループは、独自に開発した温度分布制御マイクロフローリアクタを用いて、リチウムイオン電池の電解液の主成分である炭酸エステルの着火過程を調べ、分子構造のわずかな違いで着火のしやすさが大きく異なることを実験的に示しました。さらに、炭酸エステルの統合燃焼反応モデルを世界で初めて構築しました。

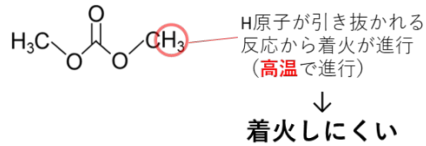
本研究成果は、発火しない安全なリチウムイオン電池の開発や運用に資することが期待されます。また、再生可能エネルギー由来の合成燃料(e-fuel)として炭酸エステルを合成燃料として用いる高効率燃焼機器の設計開発にも資することが期待されます。

本研究は、国際学術誌「Combustion and Flame」に二編構成にてオンライン掲載されました(第一編:2021年11月4日、第二編:2021年11月28日)。

本研究は、JSPS 科学研究費助成事業 16H06068、19KK0372、20J12398 の助成を受けて実施されました。

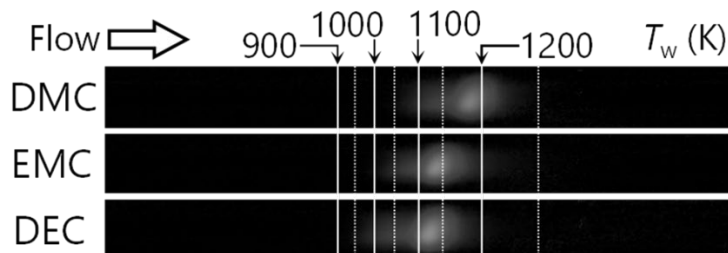
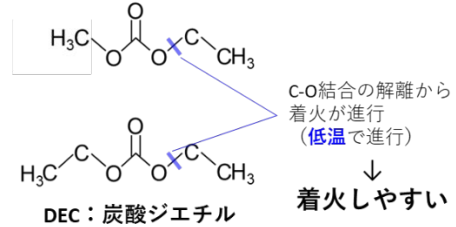
メチル基 (-CH₃) のみの炭酸エステル

DMC：炭酸ジメチル



エチル基 (-CH₂-CH₃) を持つ炭酸エステル

EMC：炭酸エチルメチル



炭酸エステルの着火過程の模式図とマイクロフローリアクタにおける微弱火炎画像
(エチル基を持つ EMC と DEC の方がメチル基のみの DMC より低温側に反応帯
が位置する=着火しやすい)

【問い合わせ先】

(研究に関すること)

東北大学 流体科学研究所

准教授 中村 寿

電話 022-217-4438

E-mail hisashi.nakamura@tohoku.ac.jp

(報道に関すること)

東北大学 流体科学研究所

広報戦略室

電話 022-217-5873

E-mail ifs-koho@grp.tohoku.ac.jp

【詳細な説明】

モバイル電子機器および再生可能エネルギーの短期間貯蔵のために、リチウムイオン電池の利用が急激に拡大しています。一方で、リチウムイオン電池の電解液に有機溶媒を使用することに起因して、バッテリーの発火事故が問題となっています。リチウムイオン電池の安全性評価として、釘差し試験等が実施されていますが、これらの試験では発火の外的要因を模擬的に与えることで発火の有無を調べており、電解液の相変化や化学反応といった物理化学現象をすべて含む複合的試験です。電解液自身の燃焼学に基づく着火性評価はこれまで実施されておらず、その着火の素過程も不明でした。

本研究では、試料の着火のしやすさの評価と温度域ごとの化学反応の分離観察を実現できる独自の温度分布制御マイクロフローリアクタを用い、リチウムイオン電池の電解液の主成分である炭酸エステル⁽¹⁾の着火特性を調べました。エチル基(-CH₂-CH₃)を持つ炭酸エステルは熱分解反応が低温で進行するため、メチル基(-CH₃)のみの炭酸エステルより着火しやすいことが分かりました。

着火のしやすさの指標として引火点がしばしば使われますが、これは化学反応のしやすさだけでなく、蒸発のしやすさに強く依存します。エチル基を持つ炭酸エステルはメチル基のみの炭酸エステルより蒸発しにくい⁽²⁾ため、引火点の指標では着火しにくくなりますが、化学反応の観点では着火しやすいこととなります。本研究により、化学反応と蒸発の特性を切り分けて着火性を評価し、それぞれの特性に応じた発火対策を検討できるようになりました。

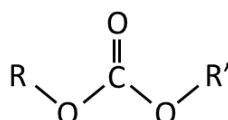
さらに、炭酸エステルの統合燃焼反応モデルを世界で初めて構築し、実験結果を正確に予測可能であることを示しました。

これらにより、リチウムイオン電池の電解液主成分の正確な着火限界予測が可能となり、発火しない安全なリチウムイオン電池の開発や運用に資することが期待されます。

なお、炭酸エステルは再生可能エネルギー由来の合成燃料(e-fuel)としても注目されており、本研究の成果は、これらを合成燃料として用いる高効率燃焼機器の設計開発にも資することが期待されます。

【用語説明】

炭酸エステル: 下図のような構造を有する分子。ここでは、R または R' にメチル基またはエチル基がついた分子を対象としている。



【論文情報】

Keisuke Kanayama, Shintaro Takahashi, Shota Morikura, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta, “Study on Oxidation and Pyrolysis of Carbonate Esters using a Micro Flow Reactor with a Controlled Temperature Profile. Part I: Reactivities of Dimethyl Carbonate, Ethyl Methyl Carbonate and Diethyl Carbonate” *Combustion and Flame*, Vol.237, 111810 (2021). doi.org/10.1016/j.combustflame.2021.111810

Shintaro Takahashi, Keisuke Kanayama, Shota Morikura, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta, “Study on Oxidation and Pyrolysis of Carbonate Esters using a Micro Flow Reactor with a Controlled Temperature Profile. Part II: Chemical Kinetic Modeling of Ethyl Methyl Carbonate” *Combustion and Flame*, 111878.