

MXene-グラフェン複合層状化合物

Keywords: MXene、グラフェン、層状化合物、Liイオン電池

ナノセオリー分野 ナノ計算材料科学グループ

速水 渉

HAYAMI.Wataru@nims.go.jp | https://samurai.nims.go.jp/profiles/hayami_wataru



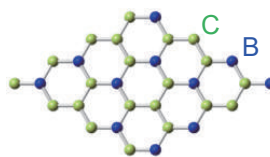
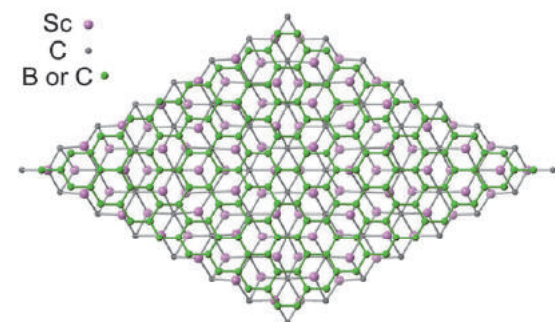
研究の背景

- NIMSで発見されたMXene-グラフェン複合層状化合物 $\text{Sc}_2\text{B}_{1.1}\text{C}_{3.2}$
- 積層の仕方やグラフェン層の詳細な構造が未解決
- BC_2 の組成からなるグラフェンはこれまで未発見

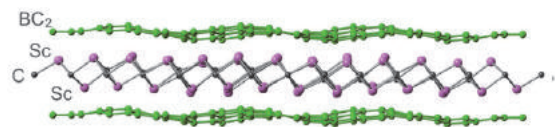
研究の狙い

- 詳細な構造の第一原理計算による理論的な解析
- 新規層状複合化合物の発見
- Liイオン電池の負極への応用

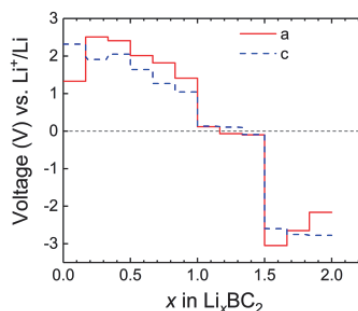
最先端研究トピックス



理論計算により明らかになった BC_2 の組成からなるグラフェン層の構造



MXene-グラフェン複合層状化合物 $\text{Sc}_2\text{B}_{1.1}\text{C}_{3.2}$ の構造



グラフェン状 BC_2 のLiのインターカレーションポテンシャル

文献

- ・ W. Hayami, T. Tanaka, J. Solid State Chem. 254 (2017) 144
- ・ Y. Shi, T. Tanaka et al. J. Solid State Chem. 148 (1999) 442
- ・ M. Onoda, Y. Shi, A. Leithe-Jasper, T. Tanaka, Acta Cryst. B57 (2001) 449

まとめ

- MXene-グラフェン複合層状化合物 $\text{Sc}_2\text{B}_{1.1}\text{C}_{3.2}$ の詳細な構造の解明
- BC_2 の組成からなるグラフェンの発見
- BC_2 グラフェンはLiイオン電池の負極材料として有望

実用化への目標

- 安定なMXene-グラフェン複合層状化合物の合成
- 実験と理論計算との対応
- 電荷に依存した安定性の解析