

ESM-RISM法によるLIB負極/電解液におけるLiイオン脱挿入過程のエネルギープロファイル

Liイオン脱挿入時のエネルギー障壁や溶媒和形成過程の情報が得られます

測定法 : 計算科学・データ解析

製品分野 : 二次電池

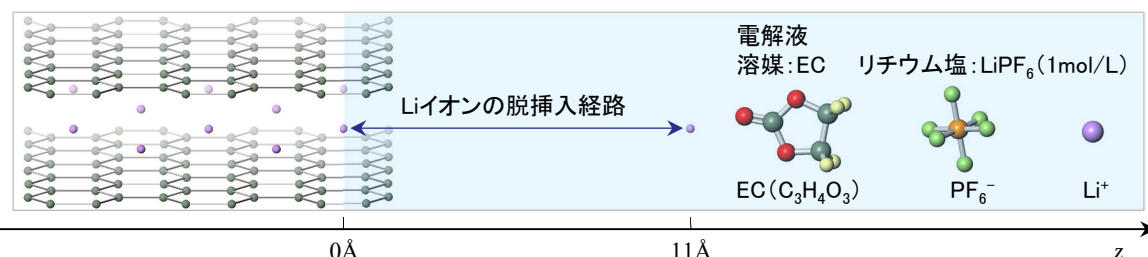
分析目的 : 化学結合状態評価・組成分布評価・構造評価

概要

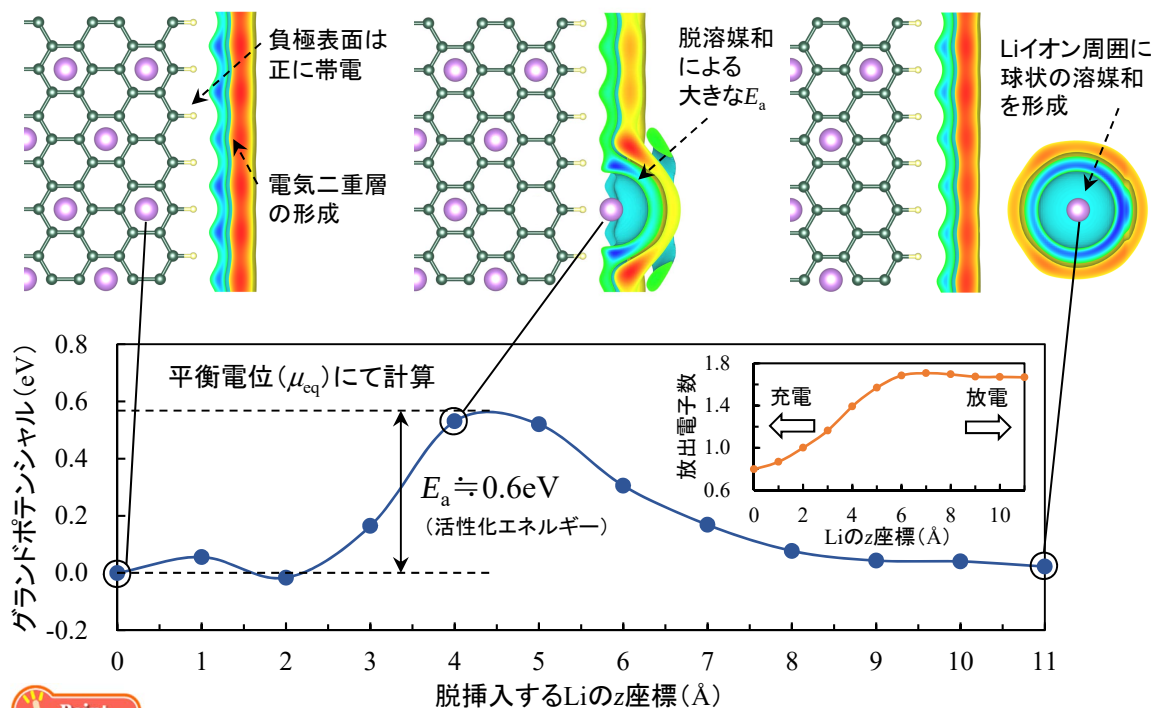
リチウムイオン二次電池(LIB)の充放電過程において、電解液中及び負極との界面近傍では溶媒和の形成、脱溶媒和、電気二重層の形成、Liイオンの脱挿入など様々な現象が生じています。本資料では有効遮蔽媒質(ESM)法とReference Interaction Site Model(RISM)をハイブリッドさせたESM-RISM法を用いて、グラファイト負極からのLiイオン脱挿入過程におけるエネルギープロファイル、溶媒和構造などの詳細をシミュレーションによって評価した事例を紹介します。LIB充放電過程のミクロスコピックな情報を得ることによって、高性能な電池材料の設計に繋がることが期待されます。

データ

■負極(LiC₁₂)-電解液界面近傍の模式図 ※各成分の構造、濃度はご着目の系に合わせて変更可



■Liイオンの脱挿入過程の電解液成分の電荷分布、エネルギープロファイル、放出電子数



✓ LIB充放電過程のミクロスコピックな情報を得ることは高性能な電池材料の設計に繋がります

※図はVESTA(<https://jp-minerals.org/vesta/jp/>)で作成

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/>