

分子動力学シミュレーションによる LIB(リチウムイオン)電解液の解析

ご指定の濃度・温度にて溶媒和のミクロな構造が得られます

測定法 : 計算科学・データ解析
 製品分野 : 二次電池
 分析目的 : 構造評価

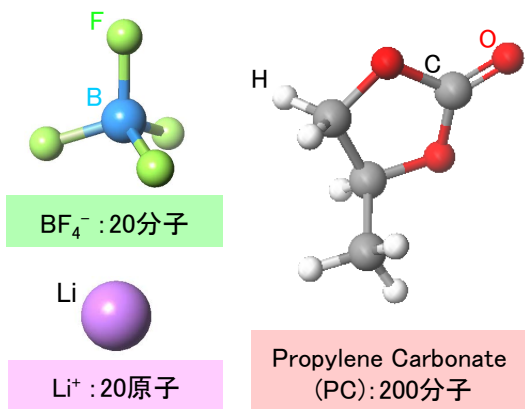
概要

リチウムイオン電池に用いられる電解液は一般的に溶媒と電解質塩から構成され、マクロには均一系と考えられますが、ミクロな視点から見ると溶媒和などの現象が起こっています。高性能な電池材料の設計にむけて、リチウムイオン溶媒和の局所的な構造や正極、負極へ挿入する際の反応などを理解することは重要です。本資料ではリチウムイオン電池電解液に対して分子動力学シミュレーションによって、リチウムイオン溶媒和のミクロな構造を評価した事例を紹介します。

データ

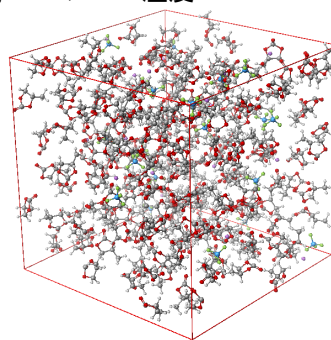
■ LiBF₄-PC溶液系のモデル

※ご指定の濃度、温度でシミュレーションが可能です。



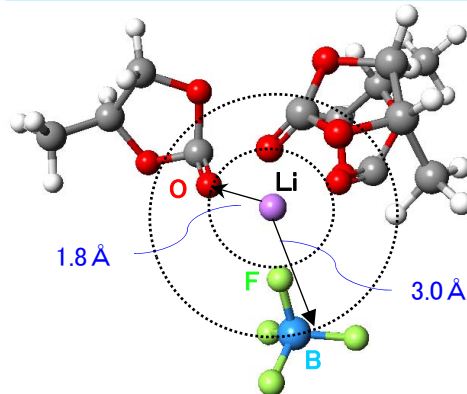
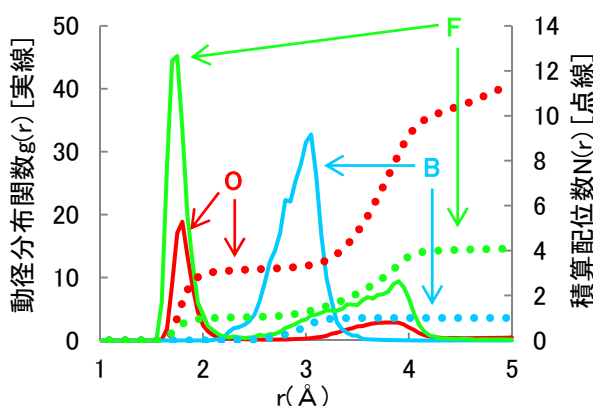
【計算条件】

濃度 : 1mol/dm³ 温度 : 378K



■ リチウムイオン周囲の動径分布関数g(r)、積算配位数N(r)

リチウムイオン溶媒和の構造



リチウムイオンの第一近接の配位数(距離)はおおよそ
O:3(1.8Å) F:1(1.8Å) B:1(3.0Å) となります。

※計算結果より一部領域を抜粋して表示



✓ ご指定の濃度・温度における溶媒和のミクロな構造や拡散の振る舞いを評価可能です

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/>