

# 量子化学計算によるリチウムイオン電池 電解液の還元耐性評価

電解液中の溶媒・添加物の還元耐性の比較、分解物の構造推定が可能

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 : 組成評価・化学結合状態評価

## 概要

リチウムイオン電池 (LIB) の負極と電解液の界面には被膜 (SEI) が生成し、その特性は電池性能に大きく影響します。優れたイオン伝導性を有する、電池の安定性向上に寄与する被膜の生成などを旨とした機能性電解液の研究開発が進められています。量子化学計算は、そのような機能を持った電解液、被膜の設計に活用できます。本資料では量子化学計算によりLIB電解液の溶媒、添加物の電子親和力を求め、還元耐性を評価しました。また結合解離エネルギーから、還元生成物の構造推定が可能です。

## データ

### ■還元耐性評価

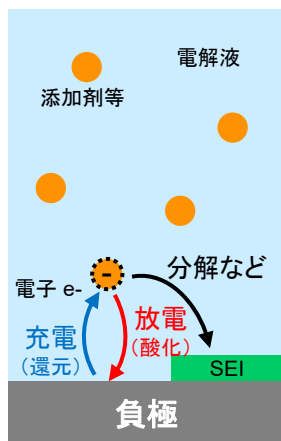


図1 SEI生成模式図

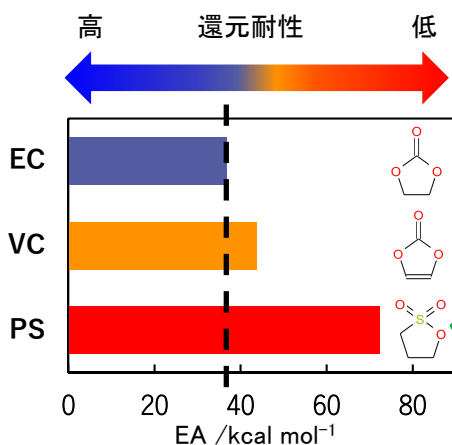


図2 溶媒と添加物の電子親和力 (EA)

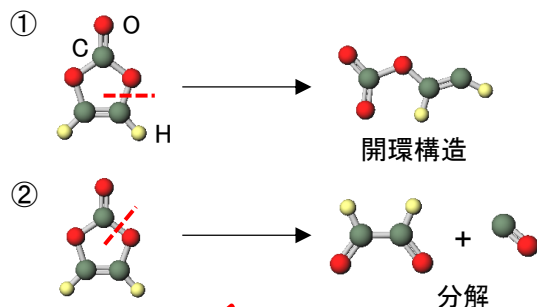
※EAの定義: 下記エネルギー差  
 $EA = E_0(\text{中性}) - E_0(-1\text{価})$   
 値が大きいほど-1価での安定化が大きく、還元されやすい

溶媒として炭酸エチレン (EC)、  
 添加物として炭酸ビニレン (VC)、  
 プロパンスルトン (PS) を想定し、  
 還元耐性の指標となる電子親和  
 力 (EA) を計算しました。

溶媒ECよりも添加物VC、PSが  
 還元されやすい  
 →VC、PSの先行還元によるEC  
 分解抑制と還元生成物のSEI形  
 成への寄与を示唆

### ■還元生成物の推定

#### VCアニオン



#### PSアニオン

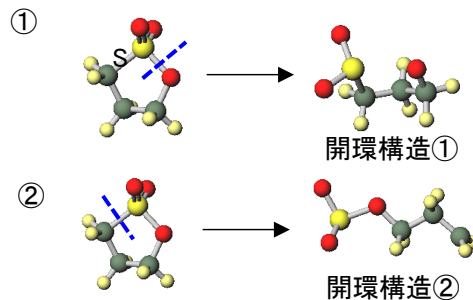


図3 添加物の結合解離構造

一電子還元により開環、分解  
 →Li塩生成、重合を示唆

一電子還元により開環  
 →Li塩生成を示唆

✓ 量子化学計算はLIBに用いられる機能性電解液の材料設計に有効です。

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  
**MIST** 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/>