

量子化学計算によるリチウムイオン電池 電解液成分の酸化還元耐性比較

電解液中の溶媒・添加剤の分解されやすさ、分解生成物などを予想できます

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 : 化学結合状態評価・その他

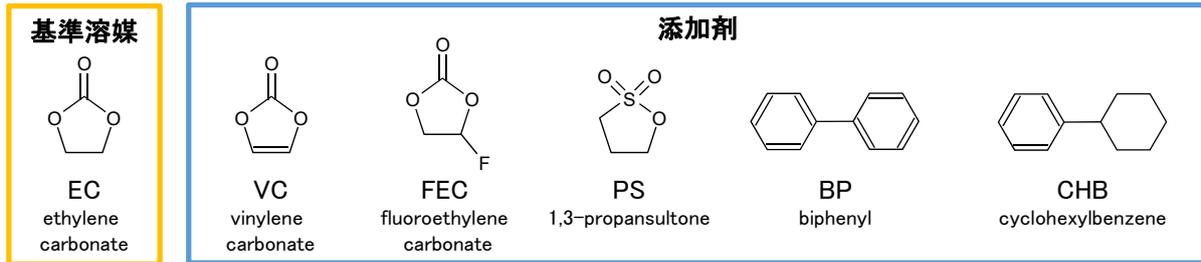
概要

起電力の高いリチウムイオン電池(LIB)において、充放電過程における電解液の分解を抑えるような設計が重要です。酸化還元耐性の低い成分を添加することで、充放電過程における主溶媒の分解を抑制するとともに、良質なSEI(Solid Electrolyte Interphase)を形成することが可能です。シミュレーションより電解液成分の酸化還元耐性を評価することで、充放電サイクルにおける各成分の分解されやすさの指標を得ることができ、SEIの成分や特性の設計に繋げることが可能です。

データ

■ 酸化還元耐性の評価

量子化学計算により、下記化合物の電子親和力(EA)・イオン化ポテンシャル(IP)を算出しました。EAが大きいと中性状態から-1価に変化した時のエネルギー利得が大きく還元耐性が低く、IPが大きいと中性状態から+1価に変化する時の必要なエネルギーが大きく酸化耐性が高くなります。



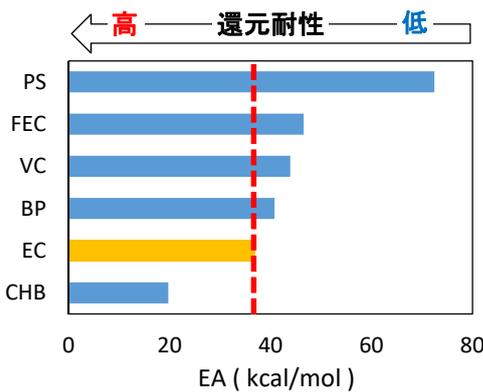
$$EA = E_0 (\text{中性状態エネルギー}) - E_{-1} (-1\text{価エネルギー})$$

EAが大きい → 還元耐性が低い

$$IP = E_{+1} (+1\text{価エネルギー}) - E_0 (\text{中性状態エネルギー})$$

IPが大きい → 酸化耐性が高い

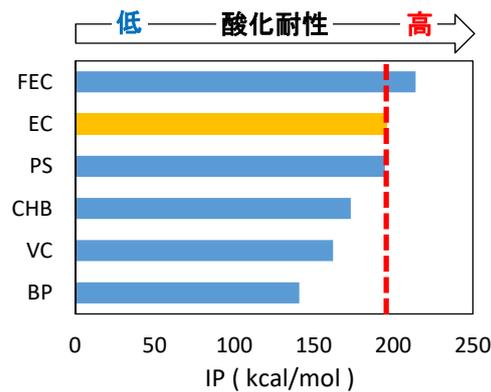
■ 還元耐性



還元耐性: PS < FEC < VC < BP < EC < CHB

ECと比較して
PS, FEC, VC, BPが優先的に還元

■ 酸化耐性



酸化耐性: BP < VC < CHB < PS, EC < FEC

ECと比較して
BP, VC, CHBが優先的に酸化

✓ 電解液中の溶媒・添加剤の分解されやすさから、SEIの成分や特性の設計に繋げることが可能

C0716_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もご覧ください。

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/