

ESM-RISM法によるリチウムイオン二次電池 電解液成分の分布シミュレーション

電解液中の溶媒和構造や負極近傍におけるリチウム塩の分布を評価可能です

測定法 : 計算科学・データ解析

製品分野 : 二次電池

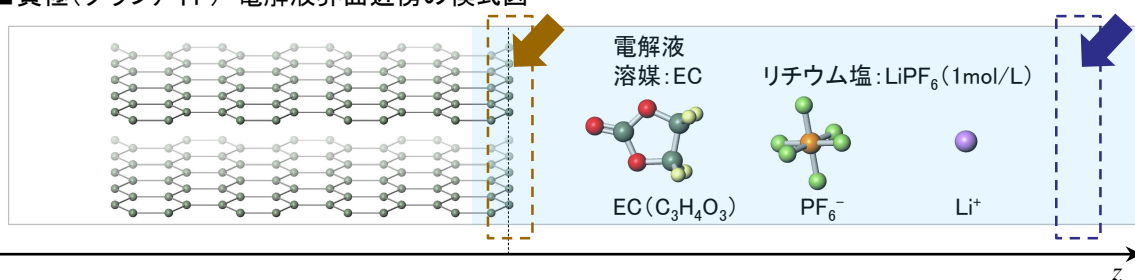
分析目的 : 構造評価

概要

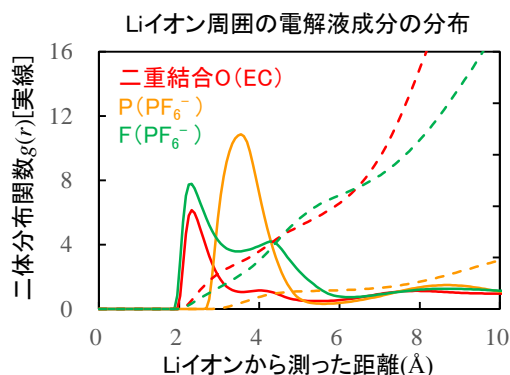
リチウムイオン二次電池の充放電過程において、電解液中及び負極との界面近傍では溶媒和の形成、脱溶媒和、電気二重層の形成、Liイオンの脱挿入など様々な現象が生じています。本資料では有効遮蔽媒質 (ESM) 法とReference Interaction Site Model (RISM) をハイブリッドさせたESM-RISM法を用いて、電解液成分のミクロな分布をシミュレーションによって評価した事例を紹介します。本手法は二次電池だけでなく、燃料電池、各種触媒反応や金属表面の腐食・防食など広範な分野での応用が期待されます。

データ

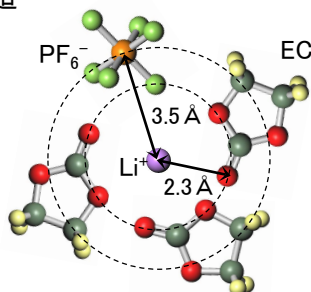
■ 負極(グラファイト)-電解液界面近傍の模式図



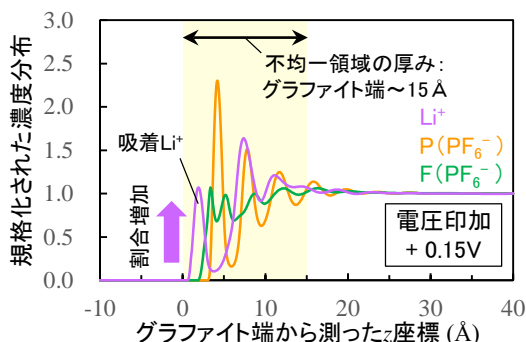
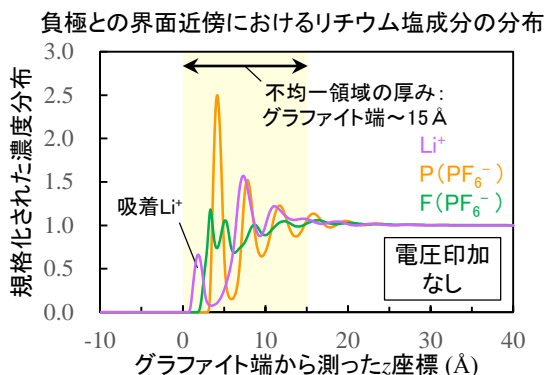
■ 電解液中の溶媒和構造



溶媒和構造



■ 負極-電解液界面近傍の電気二重層



Point

✓ ESM-RISM法による固液界面の反応メカニズム解明によって最適な電池材料の選択を効率的に行えます

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/>