

ESM-RISM法による第一原理計算を用いた 固液界面シミュレーション

電池反応においては固体（正極材、負極材）と液体（電解液）の境界（固液界面）で起こる化学反応が主役となります。第一原理計算の一種であるESM-RISM法を用いると電解液の分布や固体の電位、固液間の電解移動を計算することが出来ます。これによりお客様の電池設計を最適化する素材選択を支援します。

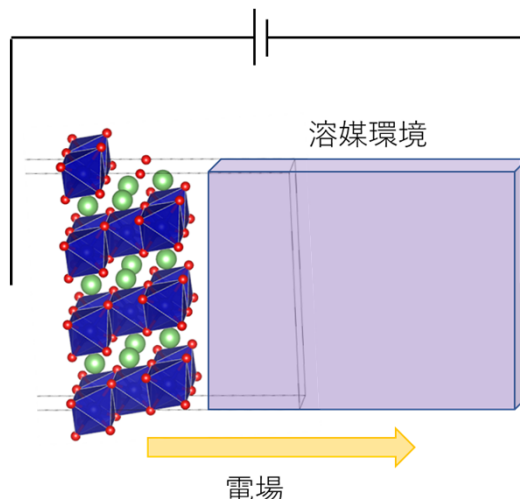
計算可能な量：電極電位、反応電位、電解液分布

考慮できる依存性：電解液温度、電解液種と濃度、電極組成と構造

計算手法のイメージ：

- ・ 結晶表面+溶媒空間
→ 溶媒濃度や温度を変化させられる
- ・ 電場をかけて計算
→ 表面の電場を変化させられる

これらの計算結果から電場や溶媒環境が変化したときの表面における反応性の変化を計算することができる。

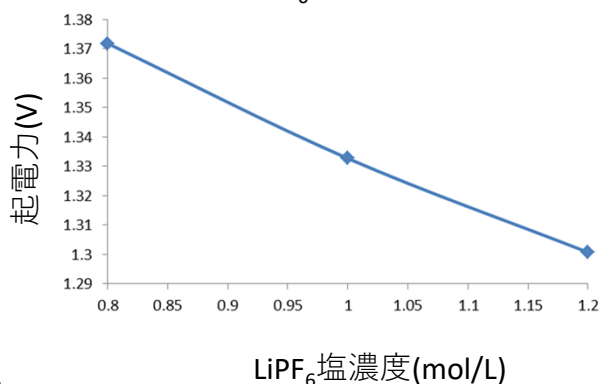


起電力のLi塩濃度依存性

各種の電位をシミュレーションして電池設計への依存性を把握できます。グラフは起電力の電解液濃度依存性を計算したものです。

電極：グラファイト

電解液：EC+LiPF₆



正極近傍のEC分布

電極上の電解液分布を3次的に可視化することが可能です。図の青い領域がEC密度小、黄色が大を表しています。

正極材：LiCo_{1/3}Mn_{1/3}Ni_{1/3}O₂

電解液：EC

