

第一原理計算によるリチウムイオン電池正極材料の容量劣化解析

Analysis of capacity deterioration of positive electrode material of lithium ion battery by first-principles calculation

住友金属鉱山 °吉尾 里司, 榎 孝一郎

Sumitomo Metal Mining Co.,Ltd. °Satoshi Yoshio, Koichiro Maki

E-mail: satoshi_yoshio@ni.smm.co.jp

リチウムイオン電池は充電が可能な二次電池の一種であり、そのエネルギー密度の高さから電気自動車やノート PC、スマートフォンなどに使用されている。リチウムイオン電池は正極、負極、セパレータ、電解液などからなるが、その中でも正極材料は電池特性を特徴づける重要な材料であり、ニッケル酸リチウム(LiNiO_2)やコバルト酸リチウム(LiCoO_2)などが実用化されている。ニッケル酸リチウムはコバルト酸リチウムよりも放電容量が大きく、安価であるといったメリットがある一方、大気暴露により容量が低下するという課題を抱えている。そこで、我々は第一原理計算を用いて、ニッケル酸リチウムの容量劣化現象の解析を試みた。

第一原理計算には VASP(Vienna Ab initio Simulation Package)を用い、交換相関汎関数として PBE 汎関数を用いて計算した。大気暴露による容量低下は表面反応であるため、ニッケル酸リチウムの代表的な表面である(110)表面と水分子との反応について検討した。はじめに(110)表面が露出した場合の安定構造を計算により求め、次に Figure 1 に示すように表面近傍に水分子を配置し、水分子が吸着した場合の安定な表面構造を計算した。その結果、水分子中の酸素原子が表面のニッケルに配位する形でニッケル酸リチウムの表面に結合することがわかった。さらに、水分子の吸着により、表面のリチウム原子が浮き上がり、水分子の吸着を繰り返すことで、そのリチウムが水分子中に拡散していく様子が明らかになった。このように正極材料表面からのリチウムの脱離現象を可視化したので、それらについて報告する。

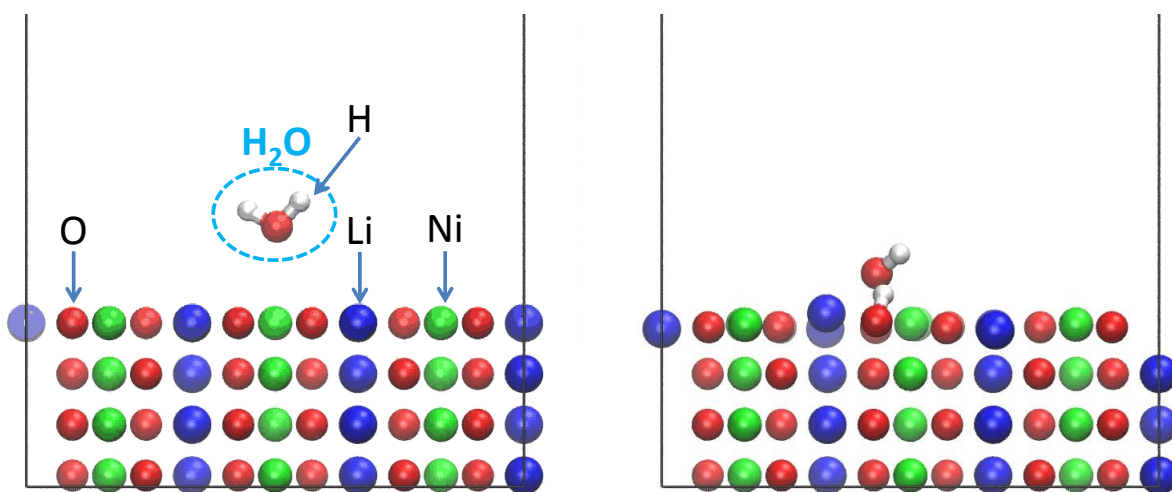


Figure 1 Before(left) and after(right) structure optimization of surface