

計算化学を用いたリチウムイオン電池における正極材と Al の固着性解析

(早大理工¹) ○永積 薫¹・山口 勉功¹・国吉 ニルソン¹

Analysis of Adhesion Mechanism between Cathode Material and Aluminum Foil in Lithium-Ion Batteries Using Computational Chemistry (¹*Graduate School of Environmental Resources Engineering, Waseda University*) Kaori Nagazumi,¹ Katsunori Yamaguchi,¹ Nilson Kunioshi,¹

Improving lithium-ion battery (LiB) performance necessitates understanding and controlling the adhesion between cathode materials and aluminum (Al) foil. This study utilized computational chemistry to investigate the interactions and reaction mechanisms among Al foil, cathode materials, and polyvinylidene fluoride (PVDF). Specifically, first-principles calculations and molecular dynamics simulations were used to assess the chemical reactions and energy barriers influencing adhesion.

Simulations involving the placement of cathode material ($\text{Li}_3\text{CoNiMnO}_6$) on Al foil and subsequent interfacial structure optimization revealed a tendency to form aluminum oxides and composite oxides. Additionally, simulations indicated that PVDF decomposes under heating, producing byproducts (HF and F_2) that react to form a fluoride layer (AlF_3) on the Al foil surface. Furthermore, modeling of complex interactions and reaction pathway analysis suggested that the fluoride layer formation might affect interactions with the cathode material.

This study provides insights into enhancing interfacial stability in LiBs, paving the way for advanced material design strategies.

Keywords: Lithium-Ion Battery; Adhesion; Aluminum Foil; Computational Chemistry; Fluoride Layer

リチウムイオン電池 (LiB) の性能向上には、正極材とアルミニウム (Al) 箔間の固着性の理解と制御が不可欠である。本研究では、計算化学を用いて、Al 箔、正極材、PVDF (ポリフッ化ビニリデン) 間の相互作用および反応メカニズムの解析を行った。具体的には、第一原理計算と分子動力学シミュレーションを用いて、固着性に関連する化学反応やエネルギー障壁の評価を行った。

Al 箔上に正極材 ($\text{Li}_3\text{CoNiMnO}_6$) を配置し、界面構造を最適化した結果、Al 酸化物および複合酸化物の形成が示唆された。また、PVDF が加熱により分解し、生成物 (HF 、 F_2) が Al 箔表面でフッ化物層 (AlF_3) を形成する可能性が示唆された。さらに、複合的な相互作用のモデル化、反応経路探索を通じて、フッ化物層の生成が正極材との相互作用に影響を及ぼす可能性があることを示唆した。

本研究は、LiB における界面安定性の向上に寄与し、今後の材料設計指針の構築に貢献することが期待される。