

# プルシアンブルーのリチウムイオン伝導における電子状態変化と構造歪みの関連性

キーワード: 次世代リチウムイオン電池 (LIB) ・ プルシアンブルー (PB) ・ Li<sup>+</sup>伝導 ・ DFT計算 ・ 相互作用の可視化

## 研究背景: 電池性能向上指針

次世代リチウムイオン電池 (LIB)

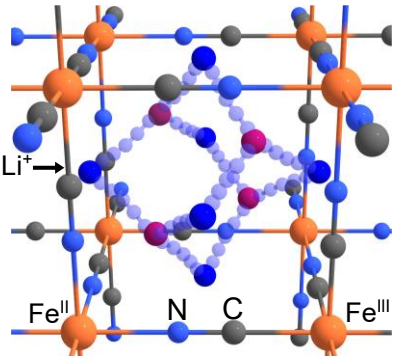


LIBの正極活物質

- ✓ 高エネルギー密度
- ✓ 早い充放電速度

理論的視点

プルシアンブルー (PB)



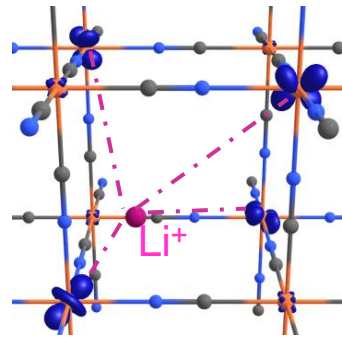
PB内のLi<sup>+</sup>伝導

- ✓ 短い伝導経路
- ✓ 三次元的な伝導
- ✓ 低い活性化障壁

良いLIBの設計 ⇔ PBのLi<sup>+</sup>伝導の理解

## 本研究の位置づけ: 細孔内の微視的メカニズムの解明

「Li<sup>+</sup>伝導×電子分極」



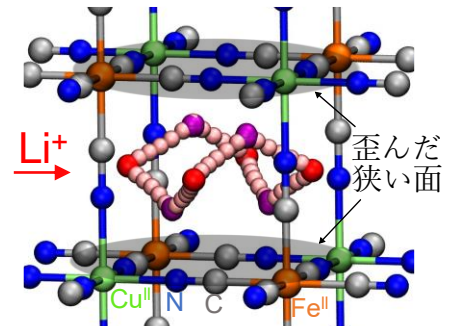
3次元的なLi<sup>+</sup>伝導

Li<sup>+</sup>-骨格間相互作用

変化

Li<sup>+</sup>伝導経路

「Li<sup>+</sup>伝導×構造歪み」



異方的なLi<sup>+</sup>伝導

「Li<sup>+</sup>伝導経路と細孔骨格の電子分極、構造歪みの三者」が互いに関連

既存研究の比較 (本研究の特色)

	当研究室 <sup>[1]</sup>	昨年度 <sup>[2]</sup>	本研究
Li <sup>+</sup> 伝導経路	○	○	○
電子分極	○	×	○
構造の歪み	×	○	○
電子状態/分子間相互作用の可視化			
	○/×	×/○	○/○

本研究の目的

PBのLi<sup>+</sup>伝導

メカニズムを、相互作用の可視化を突破口として理論的に解明。

[1] M. Ishizaki, et al., *J. Mater. Chem. A* 2019, 7, 4777.

[2] D. Ito, et al., *J. Phys. Chem. A* (投稿済み).



山形大学大学院理工学研究科理学専攻物理分野

博士課程5年一貫プログラム「フレックス大学院」 2年 安東秀峰研究室

伊藤 暖 (Email: s212117m@st.yamagata-u.ac.jp)