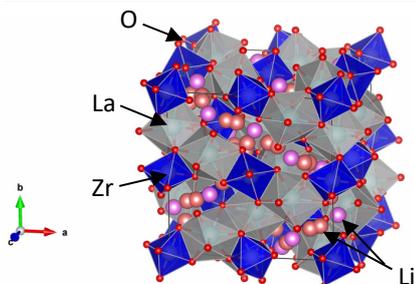


# 固体電解質LLZOの第一原理計算による 安定性評価(置換元素の影響評価)

全固体LIBに使われる固体電解質の1つである $\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$  (LLZO)は、置換元素によりイオン伝導性や電気抵抗等の電気化学特性および表面還元性が変化することが知られている。第一原理計算により置換元素の違いによるLLZOの化学状態を比較した事例を紹介する。

## 1. LLZOの置換元素による特性差異の実験報告

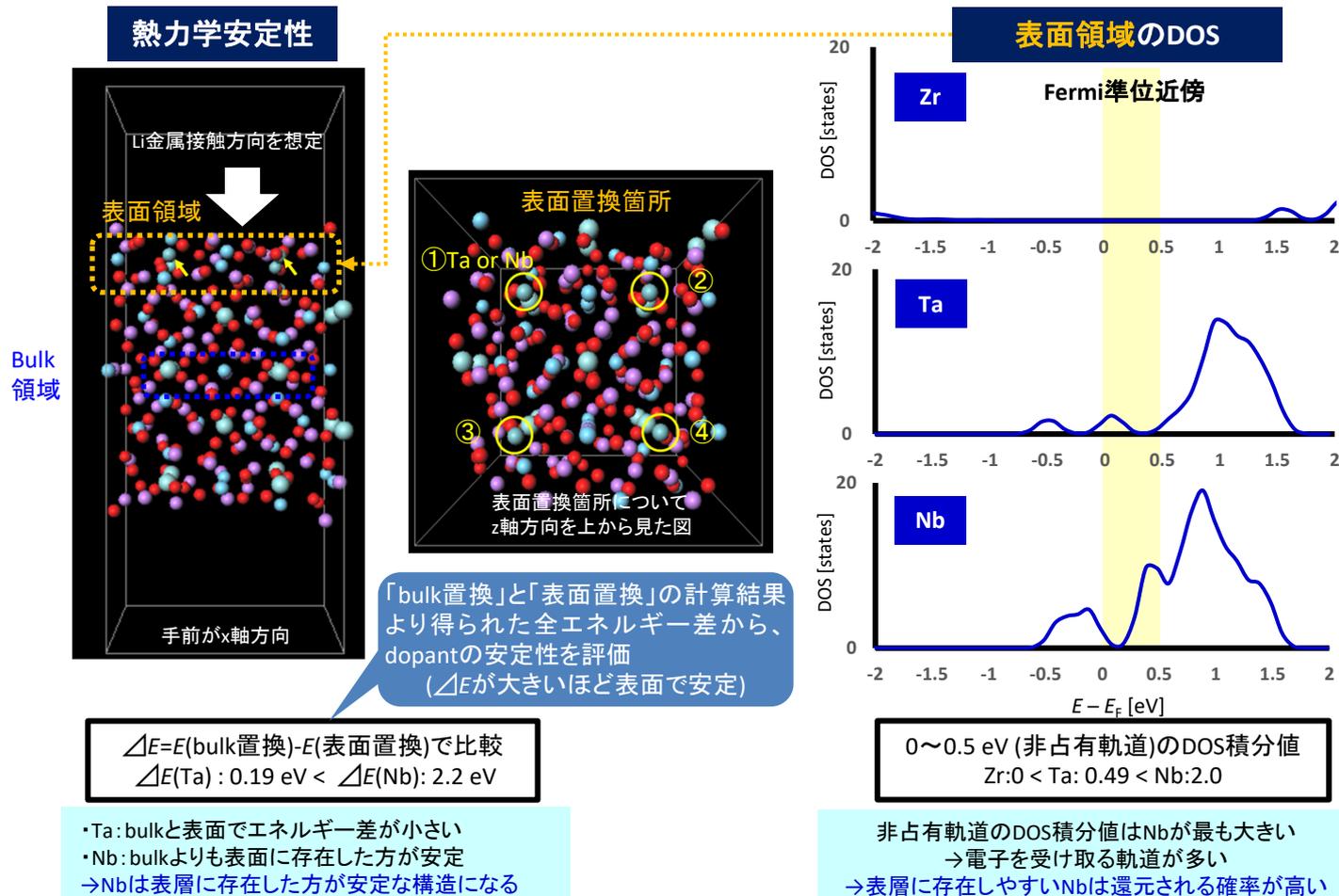


【cubic-LLZOの場合】  
Li (24d site / 96h site): Al, Ga置換等  
Zr (16a site): Ta, Nb置換等

【実験的事実】  
置換元素によりイオン伝導度やインピーダンス特性が変化することが知られている。特にTa系やAl系と比較すると、Nb系は対極Liに対し表面のZrやNbが還元されやすく、セルの抵抗値も高いことが報告されている。(DOI:10.1002/aenm.201803440)

## 2. 第一原理計算によるLLZOの熱力学安定性と還元性の評価

既報を参考にLLZOのZrサイト(表面またはbulk)をTaあるいはNbで20%置換した系でモデリングし、第一原理計算を実施。  
※全エネルギーから熱力学安定性を、状態密度(Density of states :DOS)から還元性を評価



結晶系固体電解質の熱力学的安定性・還元可能性について  
第一原理計算を用いることで、試験前/後に傾向を予測/解析可能