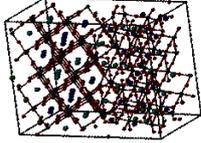


リチウムイオン電池電極における イオン拡散メソスケールシミュレーション手法の開発

(東北大)○高羽洋充・南雲亮・三浦隆治・鈴木愛・坪井秀行・畠山望・遠藤明・久保百司・宮本明

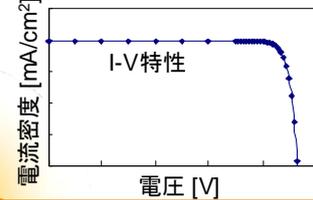
研究背景: リチウムイオン電池の性能の改善には、正極材内部でのリチウムイオンの拡散挙動の最適化が必要である。例えば、オリビン構造をもつ LiFePO_4 での Li の脱離・挿入過程は、 LiFePO_4 粒子の結晶性と拡散異方性に強く依存すると考えられており、粒子のパッキング構造を最適化することで性能を向上できる可能性がある。しかしながら、多粒子構造をとる正極材での拡散挙動は複雑であり、

結晶・粒界拡散シミュレーション

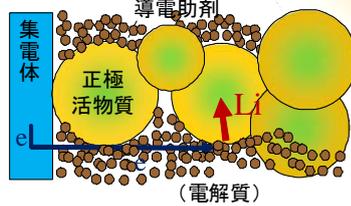


Liイオン挿入脱離機構の解明
安定性・構造・劣化特性の評価

電池の特性シミュレーション
(数値シミュレーション)



正極構造のメソスケールシミュレーション(本研究の対象領域)



活物質間での物質移動
活物質からのイオン・電子の移動
活物質・導電助材の空間分布

モデリング手法が必要
物質移動のメカニズムに関する知見が必要

粒子構造をとる正極材での拡散挙動は複雑であり、粒界構造や拡散の異方性を考慮した拡散現象のモデル化には限界があった。このようなモデル化は、劣化現象の予測にも役立つと考えられる。そこで、本研究では、リチウムイオン電池の正極材料の多粒子構造をモデル化して、リチウム拡散現象を数値シミュレーションでできるモデリング手法の開発を行った。

結果: 図1は LiFePO_4 の多粒子構造のモデルである。複雑な3次元の粒界モデルが再現されている。この図は、放電時における Li イオン拡散シミュレーション結果を示している。 Li イオンが、拡散によって粒子内部(活物質)に拡散して安定化する様子が再現されている。図2は、活物質近傍での様子を拡大したものである。計算初期(a)において活物質内部に分布していた Li イオンが拡散している、また、(d)に示されるように Li イオンは境界面を形成している。これは境界面拡散の特徴であり、いわゆる cascade model を再現していると思われる。今後、本プログラムを、ミクロンレベルでの結晶性の影響を考慮した拡散物性と構造の解明に活用していきたい。

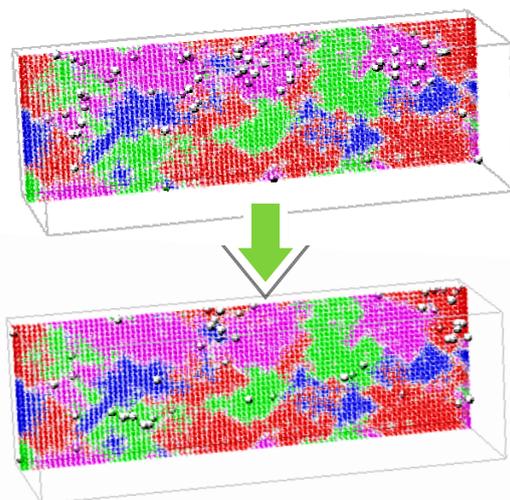


図1 (上)三次元多粒子構造モデルの初期状態, (下) 計算結果。いずれも断面図, リチウムイオンは○表示。色の違いは結晶方位性が異なることを示す。

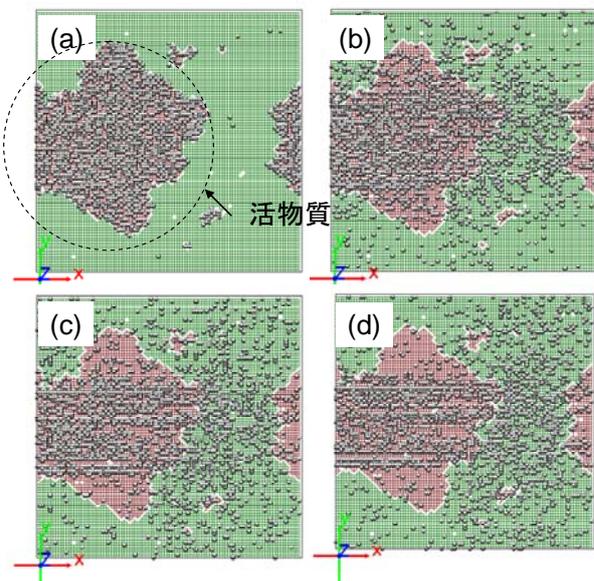


図2 三次元メソ多結晶構造プログラムの計算結果。(a)→(d)で時系列順。白い粒子が Li イオンを表す。