蓄電池プロセスのためのマルチスケール・マルチフィジックス計算化学手法の開発

Development of Multiscale Multiphysics Computational Chemistry Method for Secondary Battery Process

○畠山 望[1]、長山 千恵子[1]、鈴木 悦子[1]、宮野 正之[1]、大串 巧太郎[1]、ボノー パトリック[1]、三浦 隆治[1]、鈴木 愛[1]、宮本 直人[1]、宮本 明[1]、幸 琢寛[2]、小山 章[2]、江田 信夫[2]、長井 龍[2]、太田 璋[2] (1.東北大 NICHe、2.LIBTEC)

°Nozomu Hatakeyamau[1], Chieko Nagayama[1], Etsuko Suzuki[1], Masayuki Miyano[1], Kotaro Okushi[1], Patrick Bonnaud[1], Ryuji Miura[1], Ai Suzuki[1], Naoto Miyamoto[1], Akira Miyamoto[1], Takuhiro Miyuki[2], Akira Koyama[2], Nobuo Eda[2], Ryo Nagai[2], Akira Ota[2]

(1.Tohoku Univ., 2.LIBTEC)

E-mail: hatakeyama@aki.niche.tohoku.ac.jp

独自の超高速化量子分子動力学法によるミクロレベル量子分子ダイナミックスシミュレータ，メソレベルの電極構造モデリング，マクロレベルの充放電シミュレータを組み合わせた，マルチスケール・マルチフィジックス計算化学手法を開発し，リチウムイオン二次電池プロセスに応用した（Fig. 1）．現在，広く使用されている，Ni, Co, Mn の三種類の遷移金属で構成される三元系の正極電極について，分子レベルでは電解質との界面におけるダイナミックスやエネルギーの解析を行い，劣化挙動に関して Mn が溶出しやすいことなどの結果を得た（Fig. 1a）．粒子レベルでは，電極を構成する活物質，導電助剤，バインダーの各粒子をモデル化し，集電体上に塗布された材料の乾燥過程を Kinetic Monte Carlo 法に基づいてシミュレーションした結果，高温乾燥条件下では材料の分布に傾斜が生じて，観測と同様にバインダーの偏った最終構造が得られた（Fig. 1b）．また，Newman モデルを改良した新規マクロ充放電シミュレータでは，このような電極の厚み方向の不均一性に対する影響を調べられるように，各種材料や空隙の一次元分布を考慮した上で，負荷特性曲線を計算することができる（Fig. 1c）．

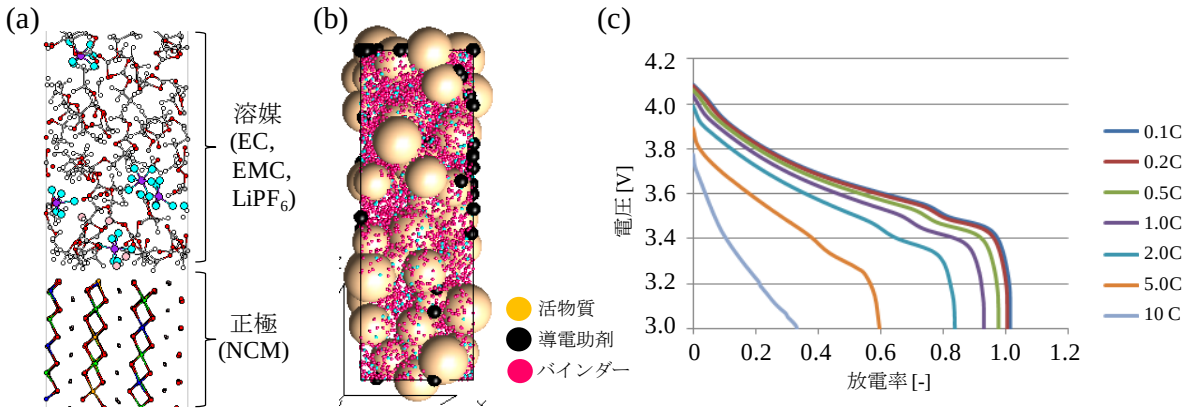

Fig. 1. Multiscale multiphysics simulation of secondary battery process: (a) UA-QCMD of cathode interface, (b) mesoscopic modeling of cathode electrode, and (c) macroscoipc discharge simulation.

© 2016年 応用物理学会