

DFT 計算による応力ひずみ曲線に基づいた LiCoO_2 の機械的特性評価

(大阪大学) ○鳥居真人・川上貴資*・山中秀介・奥村光隆

Evaluation of mechanical properties of LiCoO_2 based on stress-strain curves by DFT calculations/ M. Torii, T. Kawakami*, S. Yamanaka, M. Okumura (Osaka Univ.) /

LiCoO_2 is a typical cathode material of Li ion batteries, so it is important to prevent its degradation because of mechanical stress. In this study, we created the stress-strain curves of LiCoO_2 along each direction using DFT calculations and evaluated its mechanical properties which were obtained by them. The Young's modulus obtained by the stress-strain curve along X direction was 319.8 GPa which was similar to the data obtained by stress tensor, and we evaluated the values of stress and strain at the yield point and the break point.

問合先 : kawakami@chem.sci.osaka-u.ac.jp

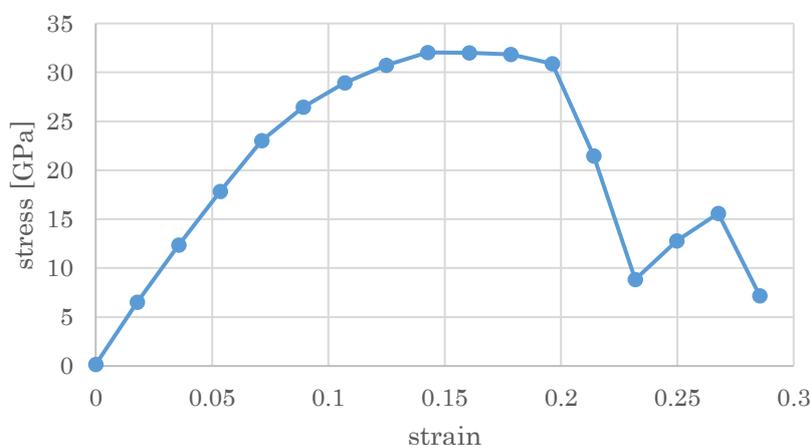
リチウムイオン電池は 1991 年にソニーによって初めて商品化されて以来、エネルギー貯蔵デバイスとして重要な役割を担ってきた。リチウムイオン電池の有名な正極材料の一つにコバルト酸リチウム(LiCoO_2)があり、その優れた電気化学的特性から、リチウムイオン電池の正極材料として長い間広く用いられてきた¹⁾。

先進的なリチウムイオン電池では、リチウムのインターカレーションやデインターカレーションの過程で、電極の破壊や機械的な不具合を防止することが重要な課題となっている。電極材料は、体積膨張、相転移、Li 拡散に伴う応力によって破壊され、電池容量の低下や出力低下を引き起こすことがある。リチウムのインターカレーションおよびデインターカレーションプロセスにおける LiCoO_2 の機械的特性を理解することは、劣化を防止する上でとても重要である。

そこで本研究では LiCoO_2 の弾性率に注目し、密度汎関数理論(DFT)を用いた第一原理計算を用いてあらゆる弾性率を計算することで、 LiCoO_2 の機械的特性の評価を行った。これまでも LiCoO_2 の弾性率を調査した研究はいくつか報告されているが、弾性テンソルを用いた弾性率の計算にとどまっているものが多く、実際に計算データから応力ひずみ曲線を作成して評価するといった研究事例は少数である。本研究では弾性テンソル計算とともに、第一原理計算を用いて作成した応力ひずみ曲線を利用した LiCoO_2 の機械的特性の評価を行い、弾性限界や破断点などといった、応力ひずみ曲線を用いて初めて議論できるようなパラメータについても評価を行った。

実際に第一原理 DFT を用いて作成した x 方向における LiCoO_2 の応力ひずみ曲線を Fig. 1 に示す。弾性変形する領域でのグラフの直線の傾きから、x 方向のヤング率が 319.8 GPa であることが分かり、同様の計算条件で得た弾性テンソルによって導出された x 方向のヤング率(333.4 GPa)と近い値を求めることに成功した。さらに弾性限界における応力とひずみがそれぞれおよそ 23 GPa, 0.07 であり、破断点における応力とひずみはそれぞれ 30~32 GPa, 0.2 であると推定された。

1) B. Huang, Y. I. Jang, Y. M. Chiang, and D. R. Sadoway, "Electrochemical evaluation of LiCoO_2 synthesized by decomposition and intercalation of hydroxides for lithium-ion battery applications," *J. Appl. Electrochem.* **28**, 1365–1369 (1998).

Fig. 1 The stress-strain curve of the simulated tensile test of LiCoO_2 along X direction.