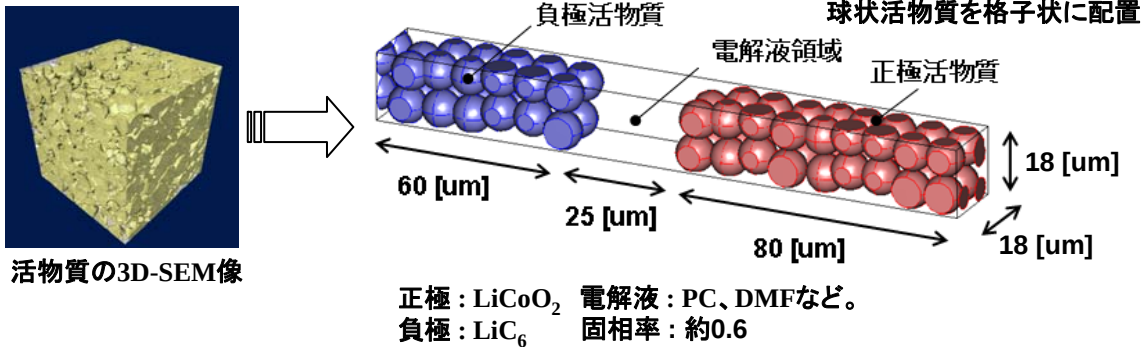
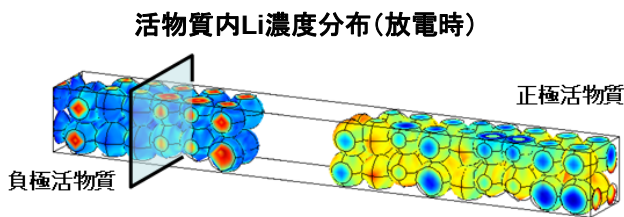


■リチウムイオン電池の3次元充放電シミュレーション 3D-SEM活物質凝集モデルに基づく充放電特性解析

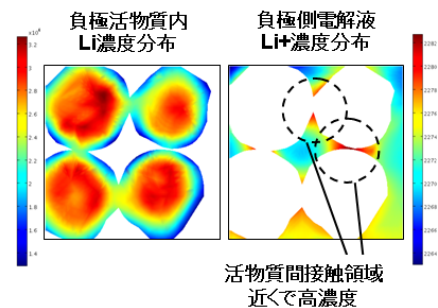
リチウムイオン電池の充放電シミュレーションにより、充放電時における現象の把握、活物質および電解質の設計指針構築への寄与を目指しています。
活物質の凝集構造モデルは任意に組むことも可能ですが、ここではより実試料に近いモデルとして、3D-SEM観察で得られた立体構造を基本として、立体格子モデルを基にシミュレーションした例を紹介します。



下の図(左)は、放電時における活物質内Li濃度分布を表しています。負極活物質では中心から表面にかけて、正極活物質では表面から中心にかけて濃度勾配が形成されている様子が分かります。また、これらのLi濃度分布は、活物質の位置や隣接する活物質との接触状態、空孔の幅などによって異なっていることも分かります。より詳細に分布を見るため、負極活物質領域のある場所の断面をとったのが下の図(右)です。活物質間の接触領域近傍の電解液では、Liイオン濃度が比較的高くなっている様子が分かります。このように活物質凝集構造を3次元で模擬することで、従来型の均質化1次元モデルでは捕らえることが出来なかった詳細な分布データを知ることが可能となり、セルレベルでの電池特性のボトルネック探索に役立ちます。

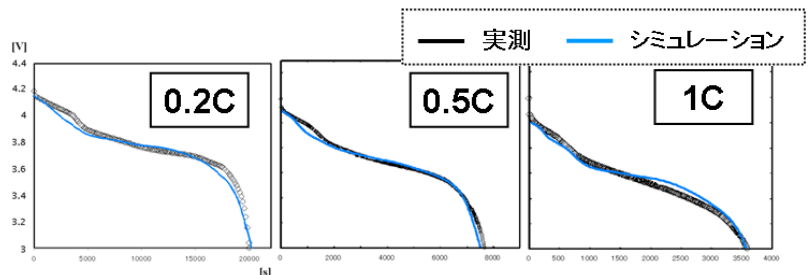


活物質断面のLi濃度分布(放電時)



弊社・試作電池の放電特性との比較

右の図は、弊社試作電池の放電カーブ実測値と、シミュレーションモデルの放電カーブを比較したものです。0.2-1Cにおいて、実測の放電特性を良好に再現していることが分かります。ここでは、活物質内Li拡散係数および反応速度定数について、それぞれ温度依存性を考慮しています。



お問い合わせは、株式会社コベルコ科研まで
eigyo@kki.kobelco.com