

新製品

リチウムイオン電池の電気化学/ 発熱シミュレーションアプリ (2022年6月リリース予定)

概要

Windows上で実行可能なリチウムイオン電池の充放電シミュレーションアプリを2022年6月に製品リリース開始予定です(※)。

電池セルの充放電特性を精緻に予測するには、電気化学反応・イオン輸送方程式やエネルギー保存則など物理モデルによる解析が必要となります。しかし、式の煩雑さや計算不安定性などの問題から、CAEを専門にされない実験技術者/研究者には「敷居が高い」と感じる方もおられると思います。

本アプリは、物理モデルをベースにするものの、ユーザーはアプリ上のパネルに従って設計値や充放電条件を設定するだけで、充放電中のセル電圧、イオン濃度分布、温度分布などを容易に評価することができます。また、SEI被膜成長や結晶構造転移などによる劣化進展も考慮されており、充放電サイクルやパターン印可時における電池寿命の予測に対応しています。

■第1図 1次元モデルと、3次元モデルの例

1次元モデル

COMSOL 基本機能 + コベルコ科研構築の独自機能

アプリ画面イメージ

条件設定タブ

結果表示タブ

数値出力タブ

インプット例

任意の電流パターン

アウトプット例

セル電圧、正負極電位、OCV

電圧

各劣化因子による抵抗変化

抵抗増加率

3次元モデル

コベルコ科研保有のノウハウに基づく独自モデル

- ・2次元電気化学-3次元温度連成モデル
- ・電極面内の反応分布、電流密度分布の考慮
- ・セル3次元形状での熱伝導/温度分布考慮

アプリ画面イメージ

*図は一例です。リリース版とは若干異なることがあります。

第1図に電極厚み方向の1次元モデルと、電池セル形状を考慮した3次元モデルの例、第1表にそれぞれの主な特徴を示します(順次リリース)。また、ユーザー向けの独自機能追加・カスタマイズにも柔軟に対応しています。

- 特 徴**
- ・Windows環境で実行可能
 - ・アプリ内で条件設定、計算実行、各種結果表示が可能
 - ・計算結果データのtxt/csv形式での出力も可能
 - ・使用しやすいアプリインターフェイス
 - ・COMSOLランタイムライブラリにて動作
- 想定ユーザー**
- ・二次電池の実験技術者/研究者
 - ・CAEのライトユーザー
- 活用ケース**
- ・新規材料/電池設計の事前検討、充放電特性予測
 - ・実験結果の解釈、仮説の検証(機能の範囲内)
 - ・電池の運用/制御方法、温度管理方法の検討など
- ※機能、操作方法、価格など、お問い合わせをお待ちしております。

■第1表 1次元モデルと3次元モデルの主な特徴まとめ

項 目	1次元モデル	3次元モデル
基礎方程式	Newman モデル	
濃度分布	電極	面方向2次元
温度分布	厚方向1次元	3次元セル形状
電気化学	任意に設定可能	
パラメータ		
熱物性	任意に設定可能	
電流パターン		
サイクル	CC 放電・CC-CV 充電など	
サイクル劣化	多因子劣化モデル考慮	
保存劣化	経験的ルート則	
アウトプット	txt, csv 形式など	

新技術

任意形状試料に対応した水素分析技術の確立

①概要

多種多様な任意形状試料に対応可能な水素分析サービスを開始いたしました。

昨今は、リサイクル材料中の水素量変化による影響を把握するため、電子部品材料に使用される箔材や線材、粉体などのアルミ試料の水素分析ニーズが高まっています。一般的に広く普及している不活性ガス融解-熱伝導度法では対応できず、当社が保有しているリゴー社製水素分析装置の真空加熱融解-一定容測圧法をもちいてもブロック材や板材のみの分析と制約がありました(写真1)。そこで、リゴー社製水素分析装置における分析条件を検討することで箔材や線材、粉体の分析を可能にしました(写真2)。例えば粉体の分析では、通常の測定用アルミナポートをもちいた場合、粉体の拡散や装置に設置した際の真空引きによる粉体の巻き込みが起きるため、脱ガスした石英ルツボに粉体を量りとり、粉体の拡散や装置内への巻き込みを防止することで分析を可能にしました。

②主な仕様

- (1) 分析可能金属：鉄鋼、銅、チタン、アルミニウム、マグネシウム
- (2) 分析元素：水素、その他のガス(水素換算値)
- (3) 分析時間：1~2hr
- (4) 定量下限：0.1ppm

■写真1 各分析法で分析可能な試料形状

リゴー社製水素分析装置(真空加熱融解-一定容測圧法)



LECO社製水素分析装置(不活性ガス融解-熱伝導度法)



決まった形状に加工し分析

■写真2 分析条件の検討により分析可能となった試料

リゴー社製水素分析装置(真空加熱融解-一定容測圧法)



箔材

線材

粉体

③アルミニウム試料の実測例

種類	試料形状	水素ガス量 (ppm)	その他のガス量 (ppm)
純アルミ 純度 99.7%	ブロック	0.5	< 0.1
純アルミ 純度 99.99%	線(1.5φ)	1.3	0.5
純アルミ 純度 99%	箔	2.4	0.6
純アルミ 純度 99.7%	粉	18	8.3

新技術

「全固体電池の内部抵抗を紐解く」 対称セルを用いた内部抵抗解析技術

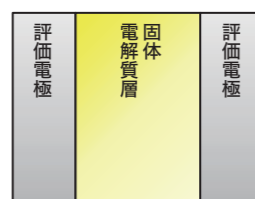
① 概要

全固体電池の電極構造の最適化に必要な、電極合材中のリチウムイオン伝導抵抗(R_{ion})および有効リチウムイオン伝導率の定量評価が可能になりました。

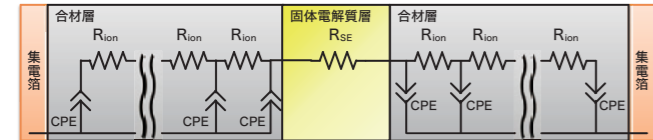
全固体リチウムイオン二次電池は高エネルギー密度、高出力な次世代電池として注目されています。すべて固体材料から構成されるため、電池のエネルギー密度を向上させるためには、高容量の活物質、高リチウムイオン伝導の固体電解質などの材料特性の向上だけでなく、リチウムイオンと電子の伝導経路が最適化された低抵抗な電極構造の実現が必須です。最適な電極構造の検討には、断面SEM等による電極構造の可視化や比較に加えて、電極合材中のリチウムイオンの伝導抵抗を定量的に評価することが重要です。

当社では、図2に示すような同一構成の電極を対向させて試作した全固体電池対称セルより得られる交流インピーダンス測定波形の45°傾き領域に対して、全固体電池用にチューニングした独自の伝送線回路モデル(図3)をフィッティングさせることにより(図4)、リチウムイオン伝導抵抗(R_{ion})を定量的に評価する技術を確認しました。これをもちいれば、全固体電池の電極構造の研究開発を大幅に加速できます。

■図2 全固体電池対称セルの構造



■図3 フィッティング解析にもちいる伝送線モデル (CPE: Constant Phase Element)

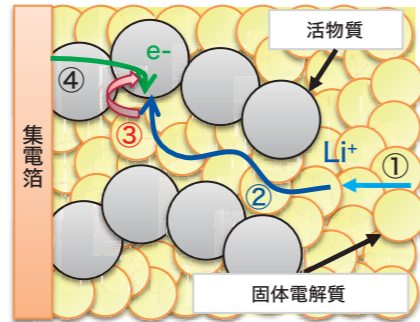


② 評価事例

固体電解質含有率の異なるサンプルのリチウムイオン伝導抵抗(R_{ion})から算出した、実効リチウムイオン伝導率の温度依存性(アレニウスプロット)を図5に示します。電極合材中の固体電解質含有率が100vol% > 53vol% > 37vol%と低下するほど、有効リチウムイオン伝導率が低下することが判ります。これは、電極合材中の固体電解質含有率の低下に伴い、増加した活物質、導電助剤の影響により電極合材内部のリチウムイオン伝導経路が屈曲し、ボトルネックの出現や伝導経路の延長により実効的なリチウムイオン伝導率が低下してしまう現象を示唆しています。また、アレニウスプロットの傾きを求めることでそれぞれの電極中のリチウムイオン伝導の活性化エネルギーを求めることができます。

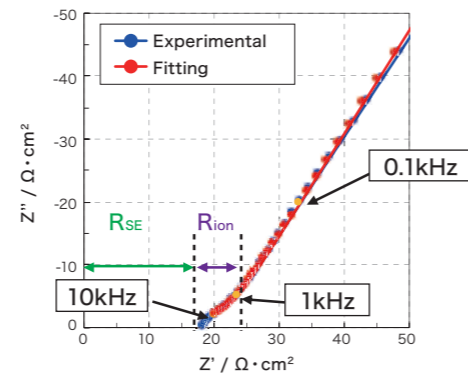
このように本技術をもちいることで、全固体電池の電極構造が、リチウムイオン伝導率に与える影響を、定量的に比較評価することができます。

■図1 全固体電池電極内部の抵抗成分のイメージ

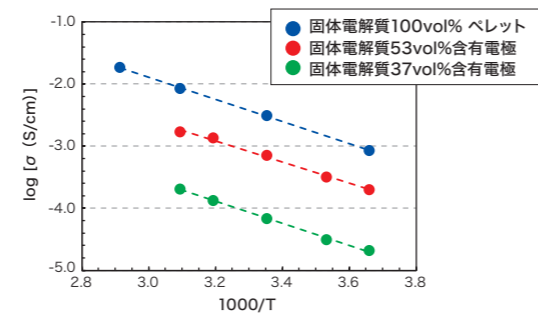


- ① 固体電解質層(セパレート層)のリチウムイオン伝導抵抗: R_{SE}
- ② 電極合材中のリチウムイオン伝導抵抗: R_{ion}
- ③ 活物質/固体電解質界面の電荷移動抵抗: R_{ct}
- ④ 電極合材内の電子抵抗: R_e

■図4 対称セルをもちいたインピーダンス測定結果の例



■図5 固体電解質含有量と有効リチウムイオン伝導率の比較



新技術

鉄筋コンクリートによる機械式定着体の特性評価試験

① 概要

高速道路に使用される橋脚や高層ビルなどの建築物・構造物は、耐久性と耐震性能が必要であり、幅広く鉄筋コンクリートが活用されています。

戦後の高度経済成長時に建造された構造物の多くは既に50年の耐用期間を終え、建て替えや補強が必要となっており、建設業に従事する就労者の減少が続き、建設現場では生産性向上が目下の課題です。特にコンクリートの現場打ち施工の構造物においては、鉄筋加工や組み立ての省力化が生産性向上に効果的です。そのため「熟練した技能」を必要とせず、現場組立時間の削減が可能である機械式継手工法、機械式定着工法が積極的に採用されています。

当社では、これまでも機械式鉄筋継手の性能評価試験(鉄筋継手の単体評価)について、土木・建築分野にて試験を受託してきました。このたび「鉄筋定着・継手指針(2020年版)(土木学会発行)」に示された3種類の試験【柱試験(じん性補強特性)、梁試験(せん断補強特性)、引き抜き試験(強度・抜け出し量)】について、鉄筋コンクリートによる機械式定着体特性評価試験もメニューとして提供できるようになりました。

② 主な仕様

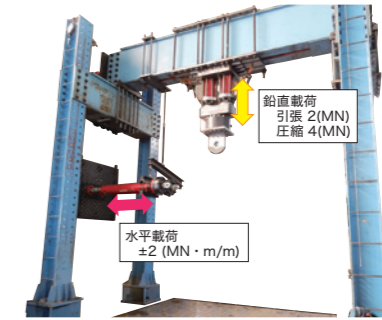
適用試験	装置仕様
①柱試験(じん性補強特性) 2軸荷装置(図1)	水平: ±2(MN · m/m) 鉛直: 引張2(MN)、圧縮4(MN)
②梁試験(せん断補強特性) 曲げ試験装置(図2)	荷重: 5(MN) スパン: 最大7(m)
③定着部試験(強度・抜け出し量) 引き抜き試験装置	鉄筋サイズ: ~呼び名D51 強度区分: ~SD590

③ 特徴

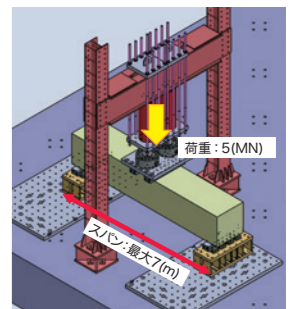
テストベッドの固定穴と定盤に設けた穴の組み合わせにより、供試体サイズに合わせ支持・載荷することができるようになりました。当社テストベッド能力を生かし、細径から太径までの幅広い鉄筋径にて対応できる試験装置となりました。

供試体サイズに限らず、繰り返し載荷や漸増載荷といった載荷方法や制御(荷重・変位)方法もお客さまのご要望に合わせて、柔軟に対応いたします。

■図1 2軸荷装置



■図2 曲げ試験装置



新技術

画像相関法オンサイト計測サービス

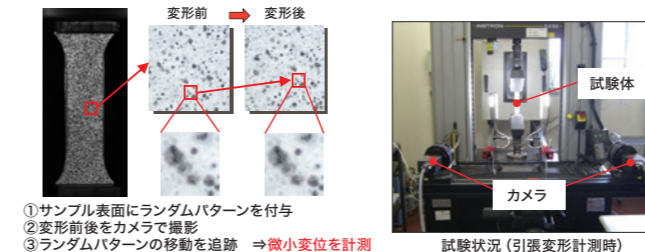
① 概要

デジタル画像相関法(Digital Image Correlation: DIC)とは、評価対象物にランダムな模様を塗装し、負荷前後の画像を取得・解析することで、変形挙動(変位、ひずみ)を可視化することができる技術です。

引張試験へ適用により、試験開始から破断に至るまでのひずみ分布の可視化が可能です(図1)。また、カメラ2台をもちいることで3次元解析も可能となります。評価対象物の形状や計測レンジの自由度が高く、その汎用性からタイヤ表面のひずみ分布計測(図2)や、メーターサイズの柱材ひずみ分布計測(図3)など、多様な評価を行っています。

引張試験のような機械変形だけでなく、温度を付与する熱変形も実施しており各種電子部品についても計測を行っています。

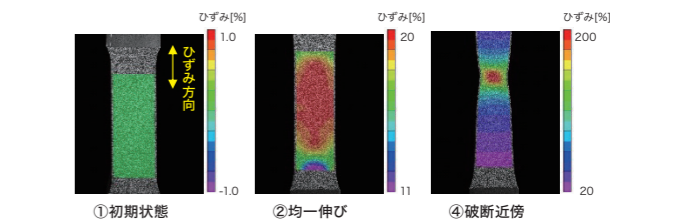
このたび、皆さまからのご要望に応じ、これまでの経験を生かして、お客さまご指定実験場などに出向いてのオンサイト計測サービスを開始しました。



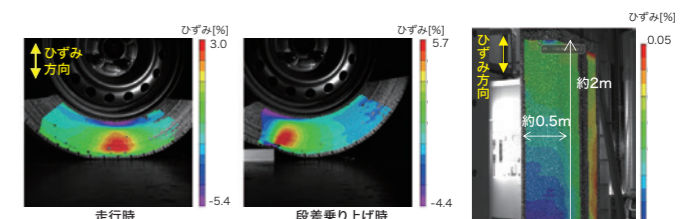
② 主な仕様

解析ソフト: Correlated solutions社製 VIC-2D, 3D
カメラ解像度: 500万画素標準
計測範囲: 数十mm角~数m角
主な評価内容: 解析領域内の変位・ひずみ分布の可視化、数値化
可視化は静止画像だけでなく動画の出力も可能

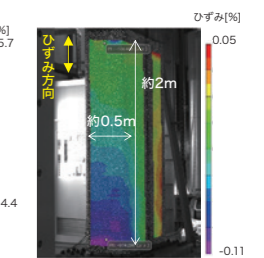
■図1 引張試験中のひずみ分布解析例(冷延鋼板の軸力方向ひずみ分布)



■図2 自動車走行時におけるタイヤのひずみ分布計測



■図3 柱に曲げ荷重を与えた際のひずみ分布計測*



③ 特徴

- ・お客さまが所有する専用設備をもちいての試験や、輸送困難な大型構造物、機密性が高く持ち出しができないものなど、さまざまな対象物のオンサイト変形計測が可能です。
- ・高速度カメラをもちいることで高速現象の計測もできます。
- ・幅広い評価物、評価領域サイズに適用可能です。
- ・計測後に任意の位置で、変位量、ひずみ量の算出が可能です。
- ・実製品形状での評価が可能です。