

2001

## リチウムイオン電池電極におけるイオン拡散経路シミュレーション

○高羽洋充<sup>1</sup>, 三浦隆治<sup>1</sup>, 鈴木 愛<sup>2</sup>, 坪井秀行<sup>1</sup>, 畠山 望<sup>1</sup>,  
遠藤 明<sup>1</sup>, 久保百司<sup>1</sup>, 宮本 明<sup>2,1</sup>

<sup>1</sup>東北大学大学院工学研究科 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-10-205)

<sup>2</sup>東北大学未来科学技術共同研究センター  
(〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-10-205)

【緒言】リチウムイオン電池の正極材料のサイクル特性の向上のためには、正極材内部でのリチウムイオンの拡散挙動を解明することが必要である。例えば、オリビン構造をもつ  $\text{LiFePO}_4$  の高速な充放電特性は、リチウムイオンの拡散挙動と大きな関連性がある。Srinivasan らは  $\text{Li}$  の脱離・挿入過程が  $\text{LiFePO}_4$  粒子の外表面から起こるとする **Shrinking core model** を提案し、粒子モデルにもとづく電池特性の評価を行っている<sup>1)</sup>。しかしながら、実際の正極材料は多粒子で構成されており、粒界構造や拡散の異方性を取り入れたメソモデルでの評価が必要である。本研究では、正極材料の多粒子メソ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きる動的モンテカルロ法の開発を行った。

【方法】正極材の多粒子構造配置を三次元的にモデル化し、その配置をノードで置き換えるプログラムを作成した。リチウムイオンの拡散はノード間の移動として取り扱った。この移動過程に動的モンテカルロ法にもとづく移動確率を導入することで、活性化エネルギー、拡散係数異方性、などの物性を反映できるようにした。

【結果】  $\text{LiFePO}_4$  の二次粒子における拡散モデルとして、図1に示すような多粒子構造モデルを構築した。粒界で区切られるそれぞれの粒子は単結晶としランダムに配向している。実験的に得られている  $\text{LiFePO}_4$  内のリチウム拡散の異方性を考慮して動的モンテカルロ法シミュレーションを行った。断面図(図2)に示されるように、リチウムイオンが初期の粒子内部から全体に拡散していることがわかる。

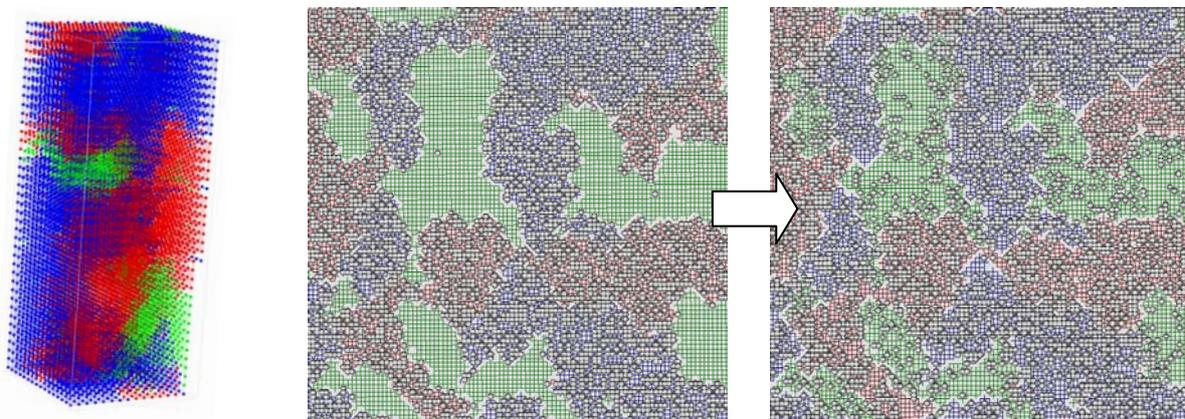


図1 三次元多粒子構造モデル 図2 計算結果(断面図)リチウムイオンは○で表示。

1) V. Srinivasan and J. Newman, *J. Electrochem. Soc.*, **151**, A1517 (2004).