

## リチウム-空気電池のマルチスケールシミュレーション

○下智美<sup>1</sup>, 金桐賢<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>, 高羽洋充<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)

<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)

【緒言】大容量な電気自動車用大型蓄電池の開発が望まれる中、大容量かつ長時間連続運転可能なリチウム-空気電池が報告された[1]。しかし、0.01-20 mA/cm<sup>2</sup>という放電電流密度の低さが実用化の妨げとなっている。電池のような、変数が複雑に絡み合った系での性能評価には、計算化学手法が有効である。そこで本研究では、三次元多孔質空気極モデルに基づくリチウム-空気電池の電流-電圧(I-V)特性シミュレータの開発を行った。

【方法】三次元多孔質構造シミュレータを用いて作成した空気極モデルを図1に示す。モデルは多孔質炭素と微粒子触媒からなり、それぞれの平均粒径を0.5 μm, 0.05 μmとした。また、空隙はすべて水溶性電解液(1M KOH)により満たされており、電池内は温度分布がなく、定常状態であることを仮定した。水溶性電解液濃度および酸素濃度は一定であるとした。さらに、空気極側および負極側での半反応はそれぞれ、 $O_2 + 2H_2O + 4e^- \rightarrow 4OH^-$ ,  $Li \rightarrow Li^+ + e^-$ とし、理論開回路電圧を3.4 Vとした。モデルの構造パラメータとして、触媒表面積および炭素表面積(空気極反応面積)、ならびに電解液断面積(イオン伝導可能面積)をI-V特性シミュレータに用いた。空気極での反応による活性化過電圧をButler-Volmer式、水溶性電解液のリチウムイオン伝導による抵抗過電圧をオームの法則によって求めることで、与えた目標電流密度値における電圧値を求めた。セパレータ( $Li_{1+x+y}Al_xTi_{2-x}Si_yP_{3-y}O_{12}$ )のイオン伝導度( $1 \times 10^{-4}$  S/cm)に起因する抵抗過電圧を考慮した場合、ならびに考慮していない場合の計算結果を実験値[1]と比較した。

【結果】I-V特性シミュレータによって求めた計算値と実験値[1]とのI-V特性の比較を図2に示す。実験で用いられたセパレータのリチウムイオン伝導度より求めた内部抵抗を考慮した計算結果は、実験値を良好に再現した。このことから、リチウム-空気電池内の抵抗過電圧の原因となる内部抵抗の大部分はセパレータに起因することが確認された。これは、実験で得られたインピーダンス解析結果[1]と一致する。さらに、空隙率の異なる空気極モデルをI-V特性シミュレータに反映させて、リチウム-空気電池の電池性能を比較・検討を行った。これにより、空気極構造の設計への応用が期待できる。詳細については、当日発表する。

1) Wang et al., *J. of Power Source*, **195**, 358 (2010).

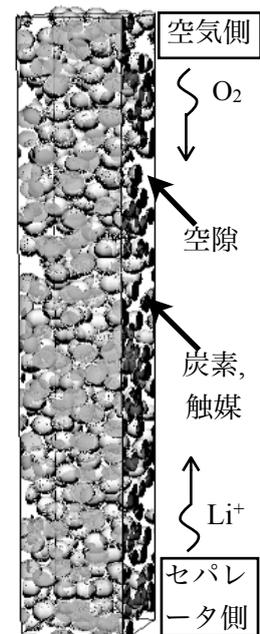


図1 空気極モデル

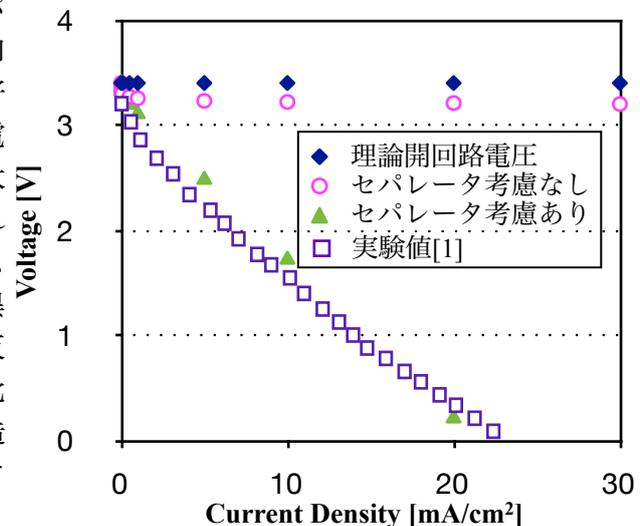


図2 リチウム-空気電池のI-V特性