

## リチウムイオン電池正極材の粒子構造を考慮した イオン拡散マルチスケールシミュレーション

○高羽洋充<sup>1</sup>, 南雲 亮<sup>2</sup>, 三浦隆治<sup>1</sup>, 鈴木 愛<sup>2</sup>,  
坪井秀行<sup>2</sup>, 畠山 望<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)

<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】高サイクル特性をもつリチウム電池の開発には、正極材料へのリチウムイオンの挿入・脱離挙動を把握し制御する必要がある。しかしながら、多粒子構造をとる正極内部における拡散挙動は複雑であり、またリチウムの脱離・挿入過程は、正極材の結晶性と拡散異方性に強く依存する。したがって、劣化現象などのモデル化においては、粒界構造や拡散の異方性を取り入れたメソモデルに基づくシミュレーションが必要である。そこで、本研究では、リチウムイオン電池の正極材料の多粒子構造をモデル化して、リチウム拡散現象を動的モンテカルロ法、さらに超高速化量子計算で解析し、粒子径依存性などがリチウム拡散性に与える影響について検討した。

【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動的モンテカルロ法プログラムを作成した。また、リチウムイオンの拡散現象を超高速化量子分子動力学法を用いて解析した。

【結果】正極材として拡散異方性をもつ、 $\text{LiFePO}_4$  についての検討結果について述べる。図(左)のように粒子径が異なる実際のカソード電極構造に近いモデルを作成し、 $\text{Li}$  イオンの拡散シミュレーションを行なった。計算から求められた見かけの拡散係数比の粒子径依存性を図(右)に示した。この図に示されるように、粒子径が減少するに従い脱離時間が減少する実測の傾向を再現した。

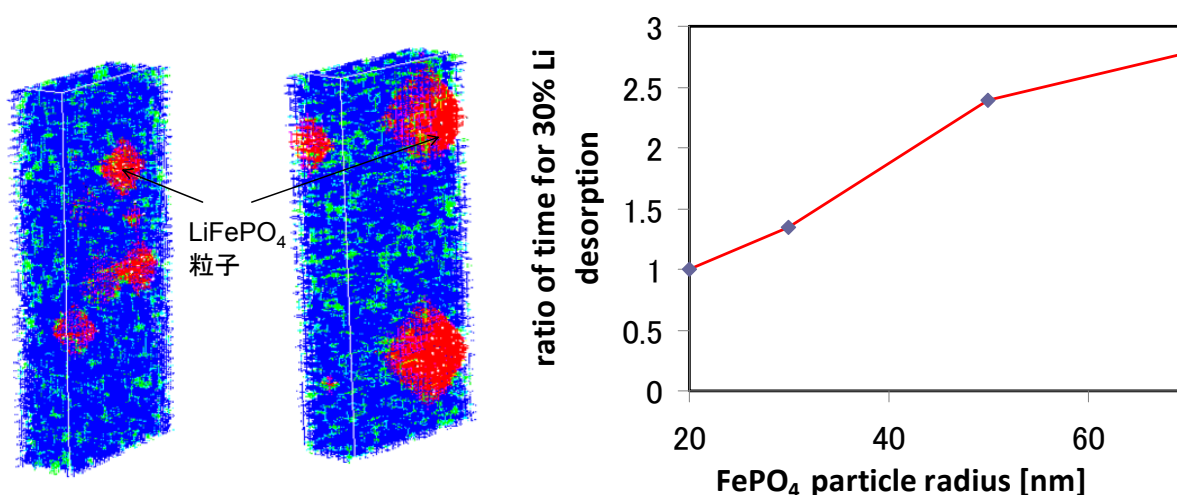


図 (左) $\text{LiFePO}_4$ 粒子径が 50 nm および 90nm の電極構造モデル  
(右) リチウム脱離時間比率の粒子径依存性