

実験融合マルチスケール計算化学に基づく Liイオン電池の理論評価手法の開発

○高羽洋充¹、鈴木 愛²、坪井秀行¹、畠山 望¹、
遠藤 明¹、久保百司¹、宮本 明^{2,1}

¹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 6-6-11-1302/701)

²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 6-6-11-1302)

【緒言】リチウムイオン電池の性能を向上させるためには、耐久性に優れと高性能な正極材料、電解液、セパレータの開発が必要不可欠である。そのためには、材料とシステム全体での最適化が必要である。計算化学は材料の電子原子レベルでの理論設計を可能とする有用な手法であるが、さらにマクロスケールの解析手法と連携をとり電池システム全体の理論設計への展開が求められている。我々はこれまで正極材料の電子状態解析など個々の材料の特性解析を目的として研究をおこなってきたが、電池システム全体を俯瞰的に設計できるものではなかった。そこで、現在、電子構造と解析する量子計算、メソスケール構造体のモデリング手法、などの各スケールレベルでの解析手法を開発し、それらを有効に連結させるマルチレベル計算化学手法の開発を進めている(図1)。また、これらシミュレーションによる検討と実験研究による開発との関係を密にするための方法論として、実験融合計算化学を提唱している。実験融合計算化学とは、種々のキャラクタゼーションのシミュレータを利用することによって、実験で得られる様々なデータとの直接的比較を可能とするものである。原子分子レベルで構築されたモデルに対してキャラクタゼーションシミュレーションを実施し、実験データと一致させることで、より高性能なリチウムイオン電池材料の開発を高効率化させる。本発表では、リチウムイオン電池の理論評価法としての実際の適用結果を報告する。

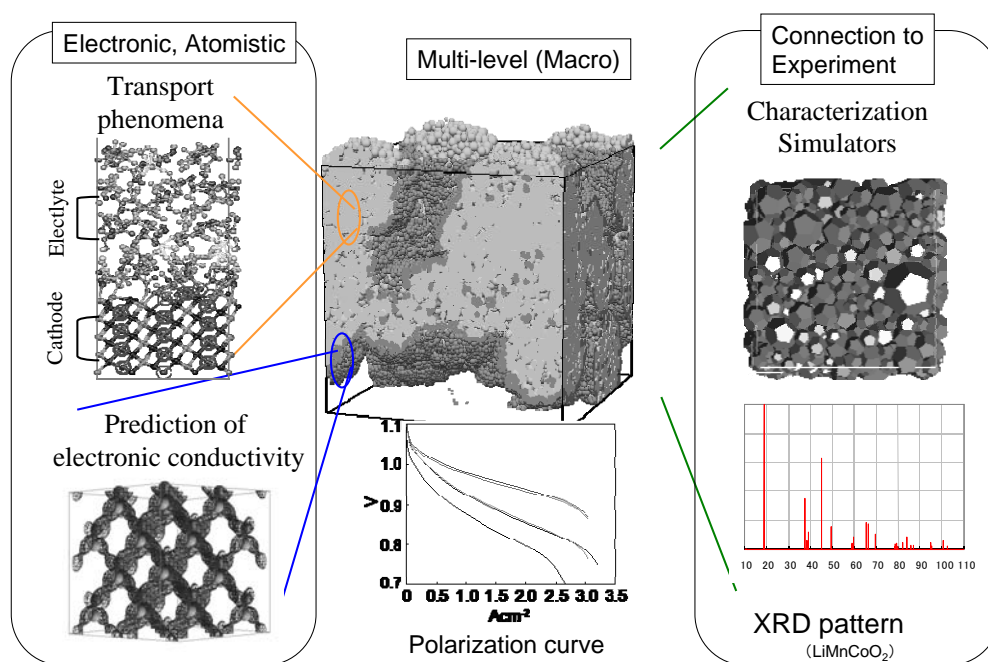


図1 実験融合計算化学を応用したリチウムイオン電池の理論評価手法の概念図