

全固体電池内部構造のX線CT構造観察と 電子イオン伝導シミュレーションの研究補助事業

研究背景・目的

次世代電気自動車(EV)用の次世代電池として全固体リチウムイオン電池が提案されている。既存のリチウムイオン電池の可燃性電解液を難燃性の無機固体電解質に置き換えた電池であり、EVに求められる高い安全性が実現できる。この安全性の高い電池である全固体電池をEV用電池として実用化するには、高速充電化が必要である。全固体リチウムイオン電池は粉体により構成される電池であり、粉体粒子間をリチウムイオンが伝導することにより充放電が行われる。よって粉体粒子の3次元的な構造が電池性能に大きな影響を与えることから、3次元構造観察ならびに観察結果を元にした電子並びにイオン伝導シミュレーションが高速充電化の検討に有効である。

そこで本研究では、X線CTを用いた全固体電池内3次元構造計測手法ならびにX線CT像を用いたシミュレーション手法の構築を実施した。

研究成果1：固体電解質圧粉体のX線CT撮像とシミュレーション

Journal of Power Sources 462 (2020) 228160

全固体電池中のイオン輸送媒体である固体電解質を対象としたX線CT撮像結果を図1に示す。全固体電池は加圧することで電池性能が向上することが知られているが、図1に示すとおり、全固体電池の加圧に伴い固体電解質粒子間の空隙の減少が確認できた。図2にCT像を用いて実施したシミュレーション結果を示す。低圧条件下では空隙が多く存在することで、電流の局所集中が発生し、電池性能を低下させる電圧損失が発生する一方で、高圧条件下では空隙が減少し、高性能電池に求められるスムーズなイオン輸送が行われることが明らかとなった。

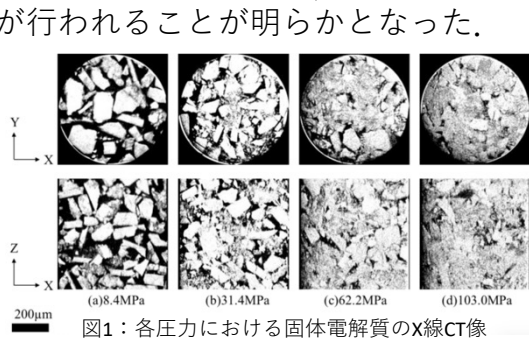


図1：各圧力における固体電解質のX線CT像
※加圧に伴い空隙が減少していることが分かる

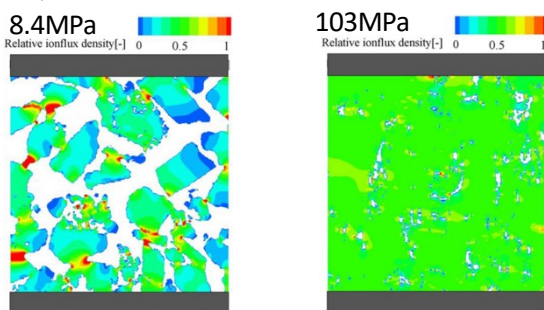


図2：X線CT像を用いた固体電解質圧粉体の3次元シミュレーション
※低圧条件(左)では空隙により局所的に電流密度が高いが高圧条件(右)では全体的にスムーズに電流が流れている

研究成果2：全固体電池模擬電極のX線CT撮像とシミュレーション

Journal of Power Sources 470 (2020) 228437

全固体電池で高速充電を行うには、活物質と固体電解質を混合・圧粉して作成された合材電極内のスムーズなイオン輸送が必要である。そこで模擬活物質と固体電解質を混合して作成した模擬電極を対象にX線CT撮影とシミュレーションを実施した。図3にX線CT像を示す。この図に示すように、合材電極中の模擬活物質と固体電解質の3次元的な分布を撮影することができた。X線CT像を用いてシミュレーションを行ったところ、電界シミュレーション単独では解析精度が低いのが、線形応力解析を併用したシミュレーションにより高精度な電極内電流シミュレーションができることが明らかとなった(図4)。



図3：模擬電極のX線CT3次元像
※模擬活物質(黒)と固体電解質(灰色)の3次元的な構造の計測に成功した

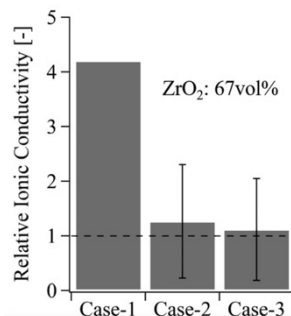


図4：模擬電極導電率のシミュレーション結果と実験結果の比較
※値が1に近いほど実験結果とシミュレーションが一致、電界単独解析であるCase-1よりも応力線形解析であるCase-2やCase-3で実験結果に近い値が得られ、高精度シミュレーションを実現できた

本研究は、公益財団法人JKA2019年度機械振興補助事業の補助を受けて実施されました。
ここに記して謝意を表します。