

全固体電池の機械力学現象と電気化学現象の 相関解明と高性能化補助事業

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。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、その電極はリチウムイオンを吸蔵する活物質とリチウムイオンを輸送する固体電解質の2つの粉体を混合ならびに圧縮して形成される。このうち圧縮は公正粒子どうしの接触性を改善し、リチウムイオン輸送ならびに反応をスムーズにする狙いがあるが、構成粒子の硬さの違いにより圧粉構造が変化することで、イオン伝導特性や電池性能が変化する可能性がある。そこで本研究では、2019年度JKA補助事業にて構築したX線CTによる全固体電池構造計測ならびにシミュレーションを進展させ、全固体電池構成材料の機械特性と電池性能の関係解明を行った。

研究成果1：活物質の硬さが電池性能に及ぼす影響の調査

Journal of Power Sources 483 (2021) 229212

全固体電池においてリチウムイオンの貯蔵を行う活物質の硬さが電極性能に及ぼす影響を実験ならびにシミュレーションにより検討した。検討にあたっては、最も硬い活物質である金属酸化物系活物質と、最も柔らかい活物質であるグラファイトを対象として、それぞれの模擬電極を作成して実験を実施した。その結果、柔らかい活物質では硬い活物質と比較して電極のイオン伝導率が高くなること明らかとなった。X線CT像を用いたシミュレーションの結果、柔らかい活物質を用いると電極内で活物質による支柱が形成が抑制され、粒子同士の接触性が向上することがその原因である事が分かった。

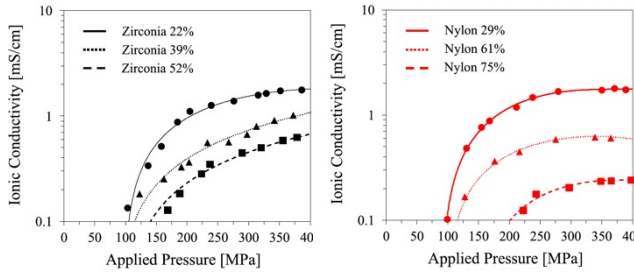


図1：模擬電極のイオン伝導率

※硬い活物質を用いた場合(左)と比較して柔らかい活物質を用いた場合(右)では同一の印可圧力ならびに体積分率において高いイオン伝導率が得られている

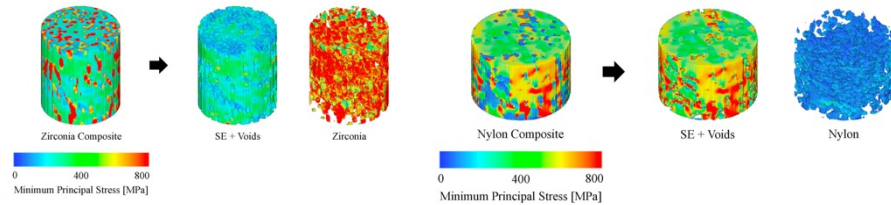


図2：模擬電極圧粉対内の応力シミュレーション結果

※硬い活物質を用いた場合(左)には活物質が支柱を形成することでSE+Voidsの圧力が低くイオン伝導性能が低いのにに対して柔らかい活物質を用いた場合(右)には活物質の支柱形成が緩和されSE+Voidsの圧力が高く、高いイオン伝導性能が得られる

研究成果2：非線形解析による高精度シミュレーション手法の構築

Journal of Power Sources Advances 8 (2021) 100049

全固体電池は圧粉することにより高い性能が実現できることから、電池の高性能化の検討にあたっては圧粉工程を含めた電池性能シミュレーションが必要である。しかし既存の線形解析手法では、粉体の力学的非線形特性に起因して誤差範囲が極めて大きかった。そこで非線形応力解析と電界解析を連成したシミュレーション手法を開発した。その結果、既存手法と比較して高精度シミュレーションが可能であることが、実験とシミュレーションの比較から明らかとなった。

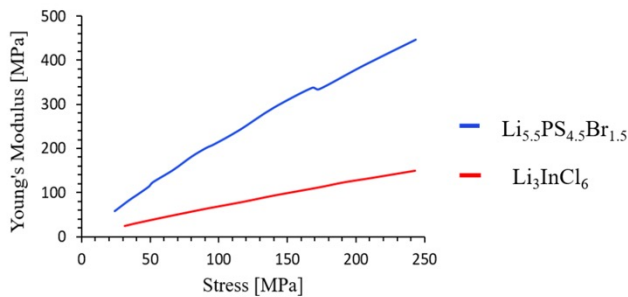


図3：固体電解質粉末集合体の応力とヤング率の関係

※ヤング率が応力に応じて変化しており、応力-ひずみ関係に非線形性があることがわかる

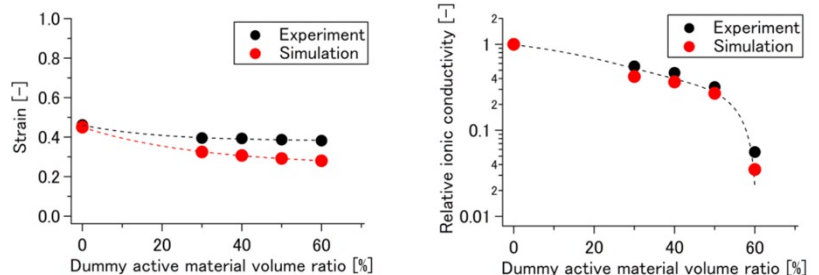


図4：非線形シミュレーション結果の実験結果との比較

※非線形シミュレーションにより実験結果と概ね一致した力学挙動ならびに電極特性が得られた

本研究は、公益財団法人JKA2020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。