

## 事例講演 2

### 第一原理計算による

### 劣化したリチウムイオン二次電池の解析

世木 隆

株式会社コベルコ科研 技術本部 材料ソリューション事業部 エレクトロニクス技術部  
主任研究員

### 講演概要

現在、Li イオン二次電池は広い分野で活用されているが、様々な環境や条件により異なる劣化機構を示す事が知られている。

今回、層状岩塩構造を有する $\text{Li}(\text{Ni}_{1/3}\text{Mn}_{1/3}\text{Co}_{1/3})\text{O}_2$ を正極に採用した自社製試作Liイオン二次電池を作成し、室温環境で約 600 回充放電させた。その試料を透過電子顕微鏡で観察すると、活物質の結晶構造は内部と表層で異なっており、表層には厚さ数 10nm の立方晶が認められた。次に層状岩塩構造と立方晶のヘテロ接合界面が拡散障壁の一因になっている可能性を調べる為に、密度汎関数理論と Nudged Elastic band 法を組み合わせLiイオンの活性化エネルギーを算出した。その結果、Liイオンは界面に接近すると共に活性化障壁が大きくなり、内部抵抗要因として考えられる結果となった。

本報告の結果は、理化学研究所のスーパーコンピュータ「京」を利用して得られたものです(課題番号:hp140095)。