

はじめにお読みください

この文章は、研究室に所属する学生が研究活動の一環として作成してくれたものです。研究室セミナーの時間に輪番で発表してもらい、研究に関連した事項の基礎知識の向上をはかりました。内容・文章ともに未だ不完全なものもありますが、2018 年度に調査してくれたものを公開いたします。

※学生の作成してくれたファイルをそのまま公開しております。ところどころ誤った記述もあるため、内容については保証いたしかねます。ご注意ください。
(2019 年度以降、少しずつ改訂していく予定です。)

2018 年 3 月 名古屋工業大学 川崎・石井研究室
<http://kawasaki.web.nitech.ac.jp/jp/tips/index.shtml>

【執筆者一覧】

・ 卒研究生

伊達 怜実、堀之内 理紗、山田 えみり、吉谷 駿、渡邊 裕介

・ M1

浅井 七海、亀岡 真祐子、近藤 航平、長谷川 毅、横井 和真、高橋 実夏子

・ M2

石亀 弘基、久野 潤也、中村 元海、林 遼治、松下 一樹、眞鍋 駿

・ D3

李 蒼昊

【2B. リチウムイオン電池】

20 リチウムイオン電池電極の動的性質（レート特性）をシミュレーションするための理論モデルとして Newman モデルが知られています。これはどのようなモデルですか？

作成日： 2019 年 2 月 22 日

担当者： 松下

Newman モデルを用いたシミュレーションではリチウムイオン電池の電極を多孔体とみなし一次元系での充放電曲線を計算する。このとき電極中のすべての点で電気化学反応が生じると仮定し、活物質相と電解液相は区別しない。

このシミュレーションで考慮される変数は以下の 6 つである。

- ① 電解液中の Li^+ 濃度
- ② 電解液の電位
- ③ 活物質表面の Li 濃度
- ④ 電解液中のイオン電流
- ⑤ 電気化学反応による電流
- ⑥ 活物質表面の電位

上記の各々に対して以下の微分方程式を解く。

- ① 電解液中の Li^+ 濃度の拡散による変化と電気化学反応による消費（拡散方程式）
- ② 電解液電位に対するオームの法則（Nernst-Planck 式）
- ③ 固相中の電子の流れに対するオームの法則
- ④ Butler-Volmer 式に使う電気化学反応による Li^+ の消費（Butler-Volmer 式）
- ⑤ 活物質中の Li の拡散（拡散方程式）
- ⑥ イオン電流と電子電流の和が全電流（Poisson 方程式）

これらの微分方程式を不連続な位置（ $x_1, x_2, x_3 \dots$ ）と時間（ $t_1, t_2, t_3 \dots$ ）に対して計算することでシミュレーションできる。

参考文献

LiCoO₂ ナノ粒子の合成とリチウムイオン二次電池への応用展開

「粉碎」No.52（2009）山木準一 土井貴之 岡田重人 著