

PRESS RELEASE (2025/03/11)

次世代電池の内部挙動シミュレーターの開発に成功

～体積膨張が激しい高容量電池の長寿命化・早期実用化に貢献～

ポイント

- ① カーボンニュートラル実現に必須である次世代電池のシミュレーターを開発
- ② 活物質粒子の膨張・収縮と全固体電池の内部現象を統合的に評価
- ③ 全固体電池の早期実用化や DX 技術を基盤としたデバイス開発に期待

概要

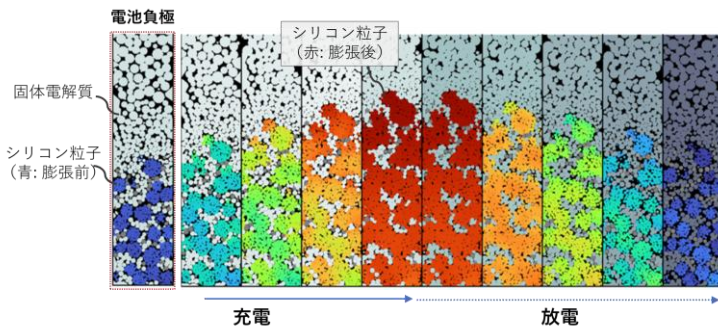
電気自動車や再生可能エネルギーの全世界的な利用普及には、高性能・安全・長寿命な電池の開発が必要不可欠です。全固体電池は、液体の電解質を用いないため、液漏れや発火のリスクがなく、容量も大きく、次世代電池として期待されています。しかしながら、電気を蓄える活物質が充電時に体積膨張を起こしてしまうため（シリコンの場合で最大 300%）、性能低下が起きやすく、寿命が短いという課題があります。また、粒子の膨張と収縮に伴い、電池内部の構造が劇的に変化し続けてしまうため、どのように性能が低下していくのか、どうすれば寿命が延ばせるのかが、十分にわかっていませんでした。

今回、全固体電池の内部機構を解明するシミュレーターが開発されました。このシミュレーターでは、充電・放電に伴う活物質の膨張と収縮から、それに伴う電池全体の内部構造変化、電池としての性能変化やその要因までを詳細に可視化できます。

九州大学大学院工学研究院の宗 マグナス 学術研究員/特任助教、井上 元 教授らの研究グループは、個々の粒子すべてに働く力を解析する技術と、電気化学反応を電位場や濃度場から計算する技術を組み合わせました。これにより、電池製造時の機械的な力から、粒子膨張に伴う内部構造変化、さらに電池の劣化までを統合的に再現できるようになりました。

今回のシミュレーターのように、粒子の動的な変形と電気化学反応計算を連成させた例は世界的にありません。このシミュレーターと、それにより得られる種々の計算結果は、全固体電池の高性能化と早期実用化に大きく貢献することが期待されます。

本研究成果は、Wiley 社の国際誌「Advanced Functional Materials」に 2025 年 2 月 9 日に掲載されました。



全固体電池内部のシミュレーション結果例

色付きの粒子は活物質のシリコン。左から右にかけてシリコンが膨張収縮しながら、充電～放電が一巡する。

井上教授からひとこと：

高度な DX 技術を用いて、新規材料開発からシームレスにデバイス・システム化につなぐこのようなアプローチは、新たな研究開発戦略として有望と考えています。今後の展開にもどうぞご期待ください。

【研究の背景と経緯】

持続可能な脱炭素化カーボンニュートラル社会の実現には、多様なエネルギーキャリアや再生エネルギー利用など多くの要素技術の革新が求められ、特にその中心となる電池について、より一層の容量・出力・コスト・信頼性の向上と利用資源の課題解決が急務です。電池は、「材料」だけで実現されるものではなく、複数の素材を組み合わせることで化学反応や輸送現象といった機能を発揮する「デバイス・システム」であり、有望な材料を迅速に製品化まで繋げられる、新たな研究開発の方法論の確立が必要です。日本は、構造材料・電子材料・磁性材料・有機材料等のマテリアル産業において、60%以上の高い世界シェアを占める一方、液系リチウムイオン電池のようなデバイスのシェアは近年著しく低下しています。潤沢な研究開発費と研究人材を擁する海外諸国に対抗していくためには、従来からの大量の試作・評価を前提とした研究開発方法を見直していく必要があります。

新たな研究開発方法として、対象システムをモデル化し、シミュレーションで検証しながら設計開発を進めるモデルベース開発（MBD）手法が注目されています。本手法が有効に機能すれば、設計工程での検証が可能となり、さらに手戻りが少なくなることで開発工数の大幅な短縮と高品質化が実現します。また、検証工程における影響評価や現象理解を通して、素材開発へのフィードバックも可能となります。

今回、そのような新たな研究開発方法の一つのモデルケースとすべく、シリコンを負極に用いる全固体電池のモデル化とシミュレーター開発に取り組みました。全固体電池は、液体の電解質を用いないため、液漏れや発火のリスクがなく、容量も大きく、次世代電池として期待されています。しかしながら、電気を蓄える活物質であるシリコンが、充電時に最大 300%もの体積膨張を起こしてしまうため、性能低下が起きやすく、寿命が短くなるという課題があります。また、粒子の膨張と収縮に伴い、電池内部の構造が劇的に変化し続けてしまうため、どのように性能が低下していくのか、どうすれば寿命が延ばせるのかが、十分にわかっていませんでした。

【研究の内容と成果】

今回の研究では、全固体電池の内部機構を解明するシミュレーターを開発しました。このシミュレーターでは、充電・放電に伴う活物質の膨張と収縮から、それに伴う電池全体の内部構造変化、電池としての性能変化やその要因までを詳細に可視化できます。

このシミュレーターでは、個々の粒子すべてに働く力を解析する技術と、電気化学反応を電位場や濃度場から計算する技術を組み合わせました。この連成計算により、電池製造時の機械的な力から、粒子膨張に伴う内部構造変化、リチウムの電池内部の分布とその変化、充放電サイクルに伴う電池の劣化までを統合的に初めて再現できるようになりました。

このシミュレーターを活用し、全固体電池の製造時に付加する圧力が、電池内部の個々の粒子の接触面積やセルの電圧、および劣化に与える影響を調査しました。充電性能は主に、応力に由来する過電圧や電池内部のリチウムイオン伝導抵抗に依存することがわかりました。また一方で、放電性能はリチウムイオン伝導に加え、電子伝導のネットワーク構造や活物質と固体電解質間の拡散抵抗によって制約されることがわかりました。これらの抵抗は、製造圧力を高めることで著しく減少させることができました。

【今後の展開】

今回のシミュレーターのように、粒子の動的な体積変形と電気化学反応計算を連成させた例は世界的にありません。今回の研究成果は、全固体電池の高性能化と早期実用化に貢献することが期待されます。例えば今後、容量と劣化性能のバランスを取るようにシリコンとグラファイトを組み合わせる場合、その最適混合比をシミュレーションで明らかにすることができます。

本シミュレーターは、拡張性や一般性も十分に有しており、汎用的な電気化学デバイスの開発プラットフォームとしても展開できます。例えば、先端材料として注目されるカーボンナノチューブを組み込んだ全固体電池も、カーボンナノチューブ構造を粒子の連鎖として表現することで対応できます。さらに、全固体電池だけでなく、他の種類の二次電池や燃料電池といったデバイスをシミュレートするためにも拡張できます。本研究のアプローチと、開発されたシミュレーターが、試行錯誤の繰り返しによるデバイス開発を、高度な計算に基づく最適設計へと変革していく一助となることを期待します。

【謝辞】

本研究は、科学技術振興機構（JST）未来社会創造事業「共通基盤」領域、本格研究「マルチスケール計測・計算技術の融合による高スループット・デバイス開発支援プラットフォーム（課題番号：JPMJMI24G1）」の支援により実施されました。課題 HP <https://star.inoue-kyushu-u.jp/>

【論文情報】

掲載誌：Advanced Functional Materials

タイトル：Role of Pressure and Expansion on the Degradation in Solid-State Silicon Batteries: Implementing Electrochemistry in Particle Dynamics

著者名：Magnus So, Takeru Yano, Agnesia Permatasari, Van Lap Nguyen, Gen Inoue*

DOI：10.1002/adfm.202423877

【お問合せ先】

<研究に関すること>

九州大学大学院 工学研究院 教授 井上 元

TEL：092-802-2747 FAX：092-802-2767

Mail：ginoue@chem-eng.kyushu-u.ac.jp

<報道に関すること>

九州大学 広報課

TEL：092-802-2130 FAX：092-802-2139

Mail：koho@jimu.kyushu-u.ac.jp