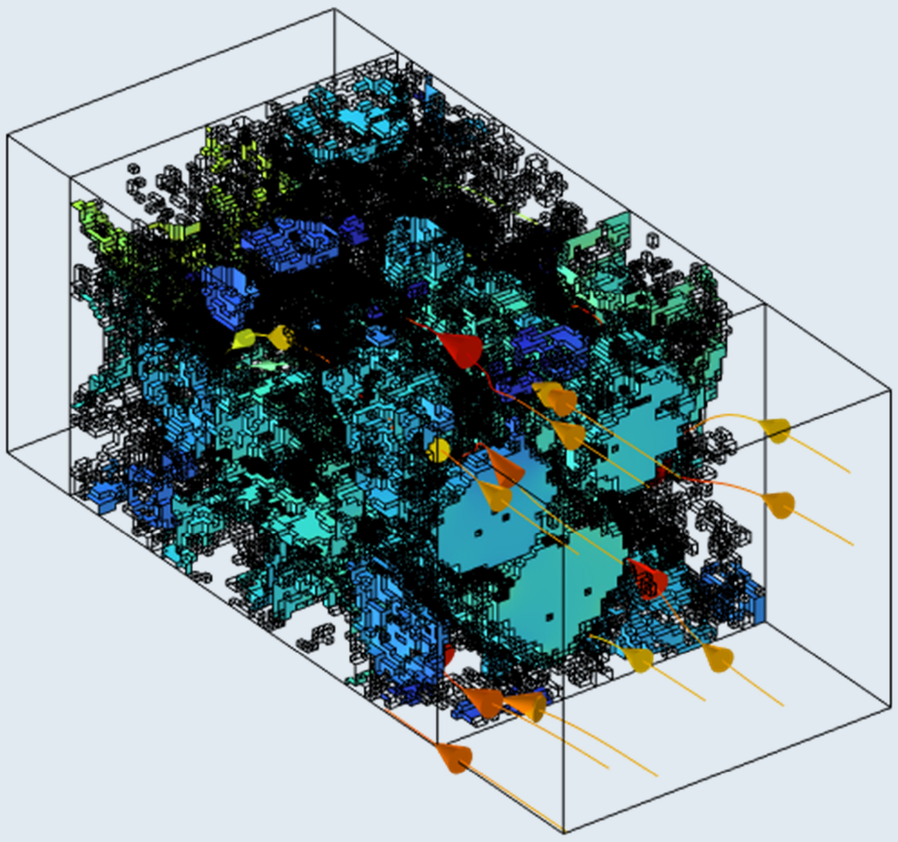


全固体電池の3次元実構造に基づく電気化学・応力連成シミュレーション

全固体電池電極の3次元実構造を対象として、充放電に伴うLi輸送、電位分布、および応力発生を連成したシミュレーション手法を構築し、亀裂進展による充放電性能への影響を評価した。

田中　健太、山上　達也

株式会社コベルコ科研,技術本部　計算科学センター,〒651-2271,兵庫県神戸市西区.

概要

近年、高エネルギー密度・高安全性を有する全固体電池の実用化に向けて、充放電に伴う活物質の体積変化や固体電解質の破壊挙動を考慮した構造設計が重要となっている。特に電極内の不均一なLi濃度分布によって発生する応力は、活物質や固体電解質中の亀裂生成を引き起こし、イオン伝導経路の喪失や容量低下につながる可能性がある。しかし、実構造レベルで電気化学現象と力学現象を連成して評価した事例は限られている。

本研究では、全固体電池電極の3次元実構造を対象として、充放電に伴うLi輸送、電位分布、および応力発生を連成したシミュレーションモデルを構築した。COMSOL Multiphysics®を用いて電気化学解析と構造解析を連成し、Li濃度に依存した活物質の膨張・収縮挙動を考慮した。また、応力場から亀裂発生条件を評価し、活物質中に発生する損傷領域を抽出し、亀裂発生に伴う有効輸送経路の変化をモデルへ反映することで、充放電容量への影響を解析した。

解析内容

全固体電池正極層を対象に、3D-SEM像から三次元実構造を生成し、充放電に伴うLi輸送、電位分布、応力発生を連成したシミュレーションモデルを構築した。また、Li挿入脱離に伴う活物質の膨張収縮の有無が放電特性に与える影響を評価した。

Li輸送、電位分布および電気化学反応については、バトラー・ボルマー式、ネルンスト・プランク式、拡散方程式およびポアソン方程式を連成して解析した。また、Li挿入脱離に伴う膨張収縮ひずみを活物質に付与し、固体力学の支配方程式に基づいて活物質内の応力場を解析した。さらに、充放電中の膨張収縮に起因する活物質内の亀裂発生・進展をPhase-Field法により表現した。亀裂進展に伴う電子伝導率の低下を考慮し、亀裂が充放電性能に及ぼす影響を評価した。

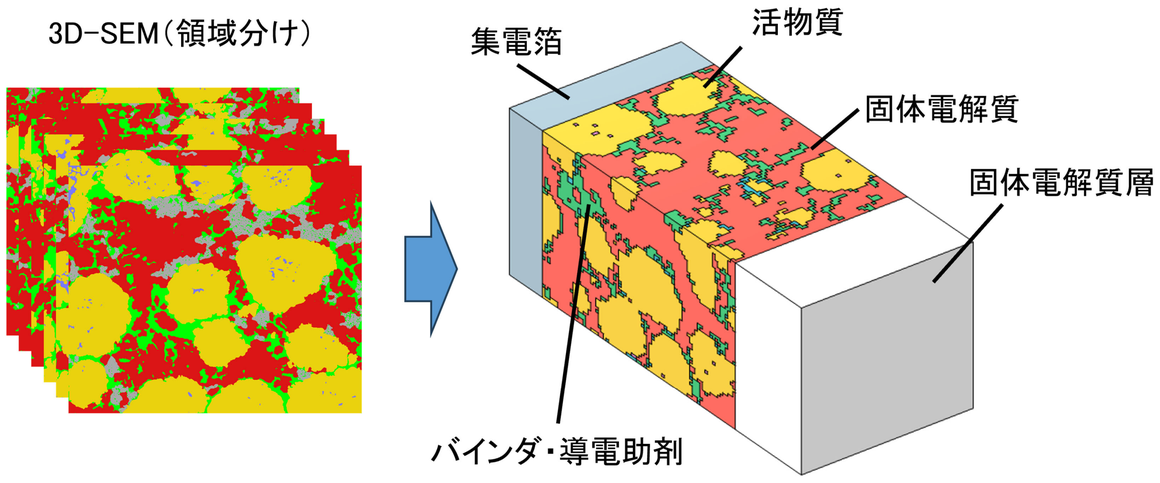


図1. 全固体電池正極3次元実構造モデル

結果

放電の進行に伴い、電極内にはLi濃度および電位の不均一分布が形成され、それに起因して活物質内に不均一な体積変化および応力分布が生じた。応力は粒子接触部や形状変化の大きい領域に集中する傾向を示し、これらの領域を起点として亀裂が発生・進展した。

Phase-Field法により亀裂進展を表現した結果、亀裂形成によって導電経路が減少し、電流密度分布の局所化が促進された。その結果、電極反応の不均一化および有効利用率の低下が生じ、放電性能の低下につながることが示唆された。これらの結果より、電極実構造における膨張収縮挙動と機械的劣化を考慮することの重要性が示された。

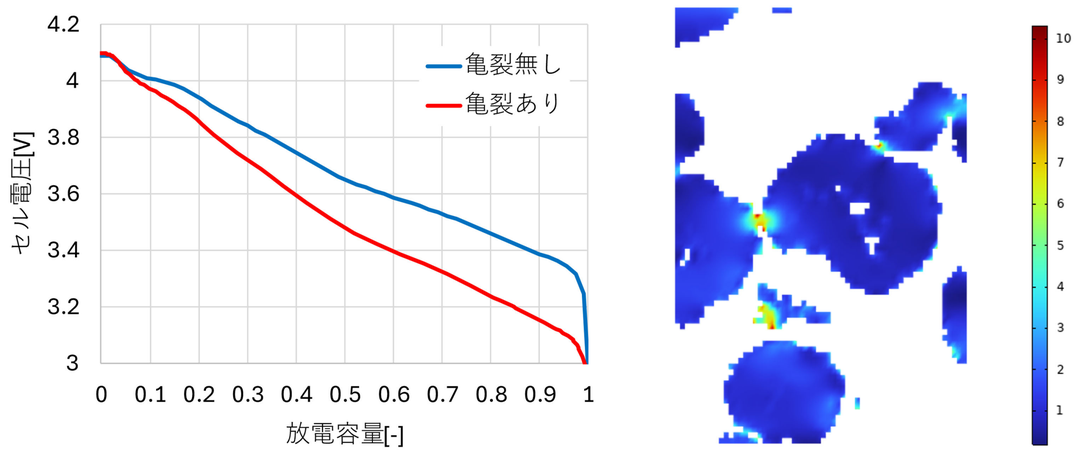


図2. 左：放電曲線、右：ミーゼス応力分布

参考文献

[1] A. M. Boyce et al., ″Cracking predictions of lithium-ion battery electrodes by X-ray computed tomography and modelling,″ Journal of Power Sources, 526, 231119 (2022).[2] Adv. Funct. Mater. 2423877(2025)

The Proceedings of the COMSOL Conference 2026 Tokyo より抜粋