

広い温度・高入出力域で予測可能な リチウムイオン二次電池の性能予測技術

Lithium-Ion Battery Performance Prediction Technology Capable of Wide Temperature and High Input-Output Range

少ない実験データから充放電反応の電気化学モデルを作成して 電池性能を短時間で高精度に予測

モビリティ・通信・産業など、リチウムイオン二次電池の用途は拡大し続けています。用途ごとに使用条件が異なるため、モデルを用いたシミュレーションによる性能予測は、導入から二次利用まで電池のライフサイクル全体で重要です。東芝は、電気化学モデルに遺伝的アルゴリズム(GA: Genetic Algorithm)や統計的手法を組み合わせることで、モデル作成に必要な実験データの数を減らしてモデル構築時間を短縮し、入出力性能・劣化を短時間で高精度に予測する技術を開発しました。低温始動や、急速充電といった従来予測が困難であった条件でも高精度に予測できます。東芝リチウムイオン二次電池 SCiB™ 向けに、一部の性能予測機能の提供を開始しました。

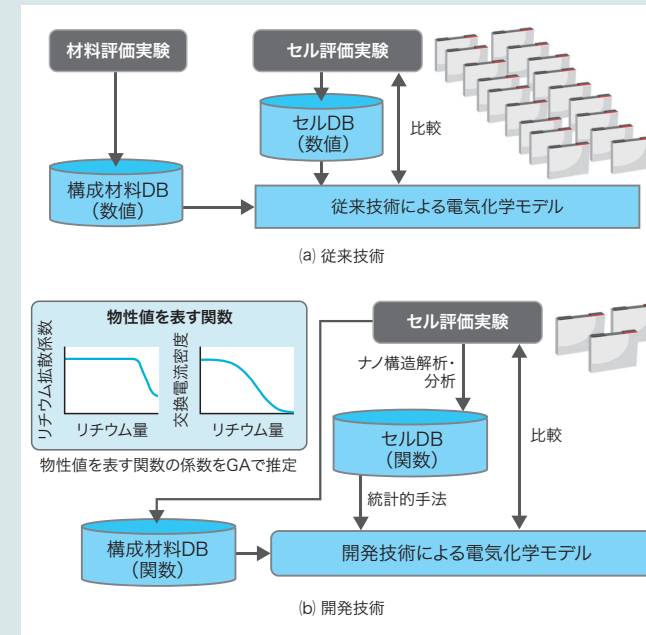


図1. 電池性能予測モデルの構築フロー

GAと統計的手法の活用で、電気化学モデルを構築するための材料評価実験とセル評価実験に要する時間を大幅に短縮できます。

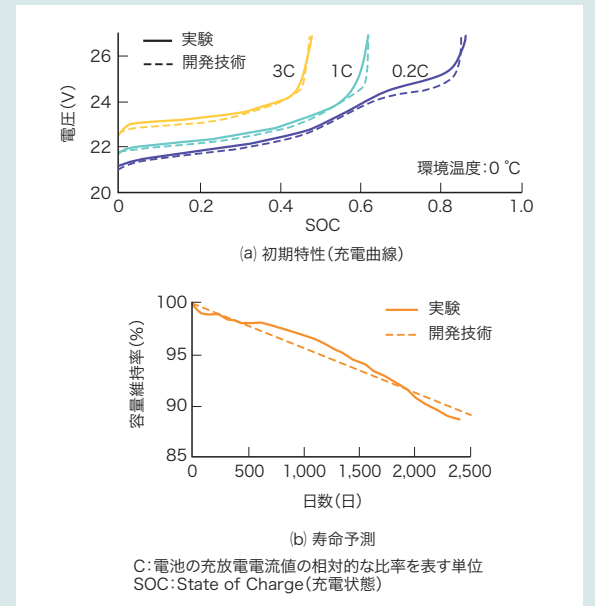


図2. 広い温度範囲と高入出力域での特性評価と寿命予測結果

電気化学モデルで得られた充電曲線は、実験値とよく一致し、低温かつ急速充電性能の予測が可能となりました。また、5年後の電池寿命の予測もよく一致しました。

背景

近年、カーボンニュートラルの実現を目指す中で、民生用電気自動車に加え、大型トラック・バス・重機といった過酷な環境下で使われる商用車や、鉄道・船舶などの大型モビリティの電動化が進み、世界的にリチウムイオン二次電池の市場規模が拡大しています。また、材料調達からリサイクルまで、電池のライフサイクル情報を記録するバッテリーパスポートの導入が欧州で進むなど、カーボンフットプリント(CFP)の低減が求められています。電池のリユース・リサイクルといった循環型利用の実現には、電池が活用される環境下での急速充電性能や、低温始動性能、冷却性能など、ふるまいを予測する技術が必要になります。このような世界的な動きの中、効果的なCFP削減のために、シミュレーションによる電池性能予測や寿命予測の重要性が増しています。

電気化学モデルによる電池性能予測

従来、高精度な性能予測技術として電気化学モデルが知られています(図1)。電気化学モデルは物理現象に基づくため、セルの実験データを基に構築する等価回路モデルと比べて、幅広い入出力と温度域での性能予測が可能なのが特徴です。しかし、材料評価実験で、正極・負極・電解液などの構成材料ごとに、リチウム拡散係数・交換電流

密度などの物性値を、温度を変えて取得するため、構成材料データベース(DB)の構築に時間を要していました。更に、電池の劣化データなどを様々な温度範囲・条件で取得するセル評価実験を行い、劣化機構を定式化する必要があります。劣化機構の要因は複数にわたり、温度や入出力条件によって変わることから、劣化評価と劣化機構定式化に数年間掛かることもありました。

そこで、電気化学モデルを短時間で構築する技術を開発しました。開発技術では、構成材料DBを構築するため、電池構成材料のリチウム拡散係数や交換電流密度などの物性値を、未知の係数を含む関数で表します。その後、電気化学モデルにこの関数を組み込み、少数のセルの実験結果と照らし合わせてGAにより未知の係数を推定します。また、劣化評価と劣化機構定式化は充放電曲線解析や放射光分析を活用して単極レベルで要因を抽出し、劣化反応式は統計的手法で決定し、パラメーターを推定します⁽¹⁾。GA法や統計的手法でのパラメーター推定には10～15セルの評価データがあれば十分であるため、電気化学モデルを短時間で構築できます。

現行製品である20 AhのSCiB™について、電気化学モデルを用いて初期特性(充電曲線)と寿命を予測し、実験値と比較しました(図2)。急速充電などリチウムの分布が起りやすい場合も、充電曲線を高精度に予測できます。寿命予測は、あらかじめ開発技術を用いて計算した結果を応

答曲面にして簡易化することで、数日を要していた5年後の容量劣化を30分以内で高精度に予測できます。

開発技術で作成した電気化学モデルにより、従来の等価回路モデルでは予測できなかった過酷環境下で使用されるアプリケーションについても、短時間で個々の運転パターンに対し、広い温度範囲と高入出力域で、高精度な性能・寿命予測が実現し、無駄のない電池モジュール設計ができます。また、電極サイズや1セル当たりの容量なども仮想設計できるため、次世代セルなどの顧客要求に合わせたセルデザインを検証できます。

SCiB™の性能を予測する電気化学モデルの提供開始

SCiB™のデジタルマーケティング向けに、構築した電気化学モデルの提供を開始しました。システムシミュレーターであるGT-SUITE⁽²⁾を通して、電気化学モデルを社外から利用できます。利用者が、初期温度・電圧・運転パターンなどを入力すると、対応する電圧・温度・出力などを評価できます。例えば、電池とディーゼルのハイブリッドシステムをシミュレーションすることで、燃費の改善効果や、適切な(運用中の劣化を考慮した上で、使用期間を通して性能を維持できる)電池搭載量の決定、冷却方法の検討などが可能になり、導入時にCFPの低減を確認できます。

今後の展望

今後は、使用後の電池の内部状態を、劣化診断で取得したデータを使って電気化学モデルに反映し、機能予測を行う手法の確立を目指します。使用済み電池の機能予測が可能になれば、長寿命なSCiB™の特長をリユース・リサイクルに活かして、電池の二次利用やリファービッシュなどの循環型利用を促進できます。更に、ニオブチタン酸化物負極セルなどの次世代電池にも、順次適用します。

文献

- Morimoto, S. et al. "Accelerated Degradation Mechanism of Ni-Rich NCM Cathode Materials at High and Low Voltage Range Combined Cycling for Li-Ion batteries". 241st ECS Meeting, Vancouver, 2022-06, the Electrochemical Society. 2022, A02-0382. <https://ecs.confex.com/ecs/241/meetingapp.cgi/Paper/155346>, (accessed 2023-07-10).
- Gamma Technologies. "GT-SUITE". <https://www.gtisoft.com/gt-suite/>, (accessed 2023-07-10).

盛本 さやか

研究開発センター ナノ材料・フロンティア研究所 機能材料ラボラトリー
日本分析化学会会員