

エネルギー変換の界面科学

電池が電気をためる瞬間をシミュレーションでとらえる

HPC | 戦略プログラム 分野

2

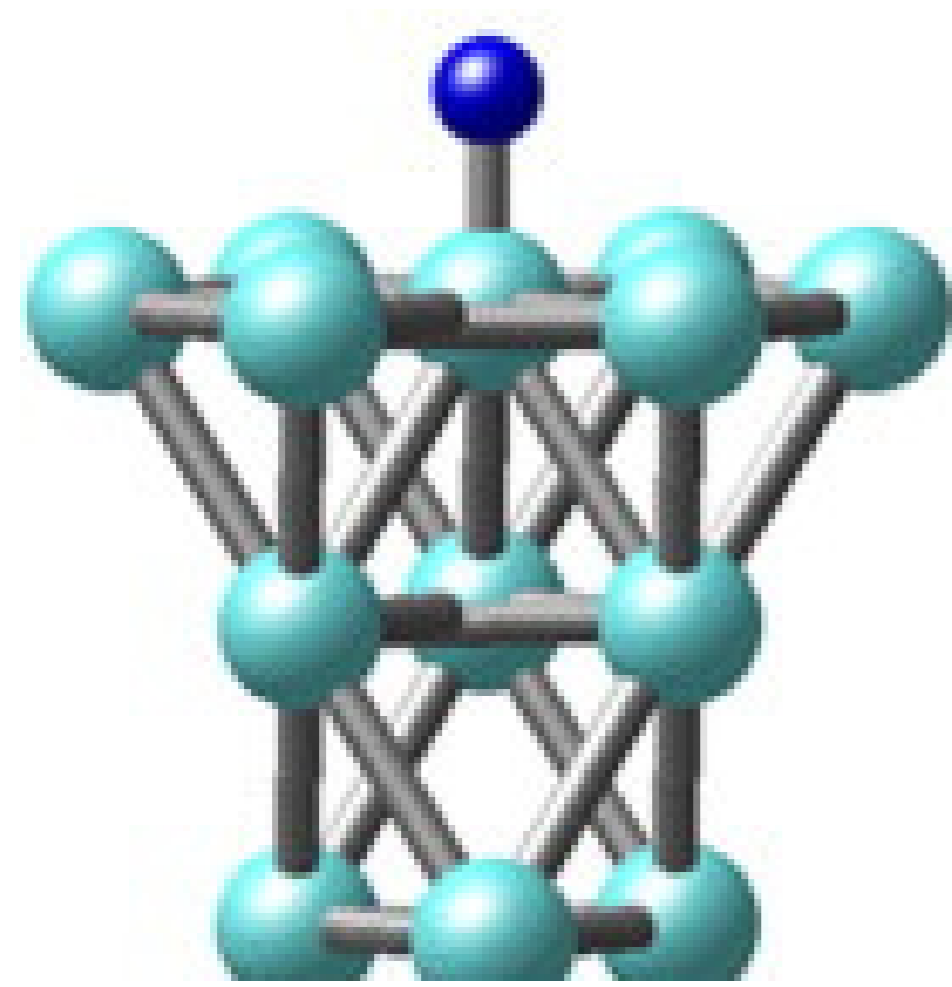
再生可能エネルギー社会の要となる電池技術。モバイル機器や自動車・家庭用蓄電池など日常生活に浸透してきています。高校の理科でもしっかり勉強する対象です。性能を上げて便利さを向上させるためには、電池の科学は重要です。それは二次電池が電気をためたり、燃料電池が発電したりする原理を熟知することによって、思いもよらなかったような発展が見込まれるためです。

「京」以前

初期の電池の計算は、電池反応が起こっているところだけを切り出して行われました。計算を簡単化しないとシミュレーションが行えないという計算機事情があったためです。

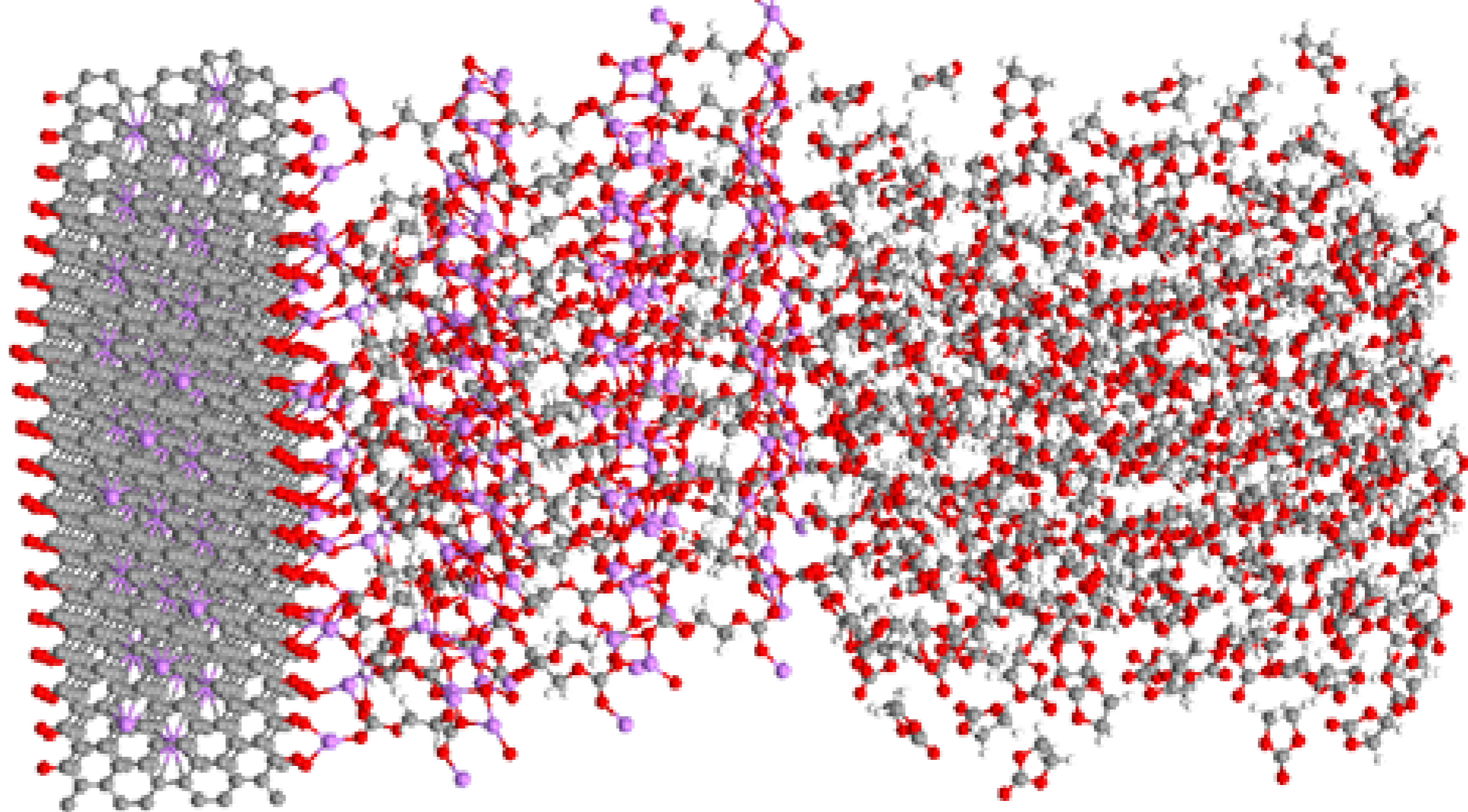
「京」でブレークスルーした計算技術

反応が起こっている周辺も取り入れないと、なかなか真実はとらえられません。電極と電解液、その間にある界面保護膜をきちんと取り入れたシミュレーションが「京」により可能になりました。これは多数の原子を取り入れた量子力学の計算が高速にしかも安定に行えるようになったためです。



2000年ごろに
用いられた模型

電極 界面被膜 電解液



リチウムイオン二次電池の界面模型

「京」での成果

電解液と電極の界面をリチウムイオンがどれだけ速く通り抜けられるのか、電池の動作中に電解液がどのように分解して電池が劣化し出すのかといったことが分かるようになりました。新型電池の材料としてどのようなものを用いるべきかが、シミュレーションを行うことによりあらかじめわかるような時代に突入しようとしています。