

蓄電池材料の第一原理計算シミュレーション

物質・材料研究機構 GREEN 館山 佳尚

目的 第一原理計算を利用して蓄電池材料の電子・イオン物性を明らかにする。

内容 蓄電池材料のうち正極材料に特に焦点を当て、第一原理計算を実行した。構造安定性、電子状態、Li空孔形成エネルギーを求めることで、正極材料の利用可能性を評価した。

結果 まずベンチマーク材料について、実験結果と整合の取れた結果が得られた。それをベースに今回ターゲットとする正極材料群の計算を行い、幾つかの有望材料に関する知見を得た。

利用した計算機	SQUID 汎用CPUノード群
ノード時間	5,670 時間
使用メモリ	24 GB
並列化	4ノード 並列

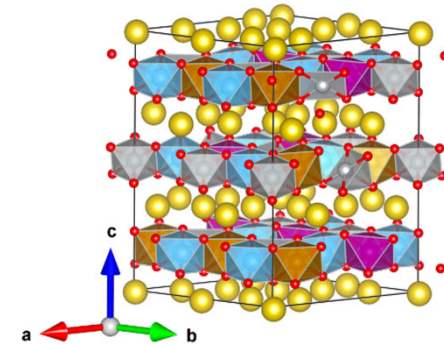


図 正極材料のイオン配置モデル