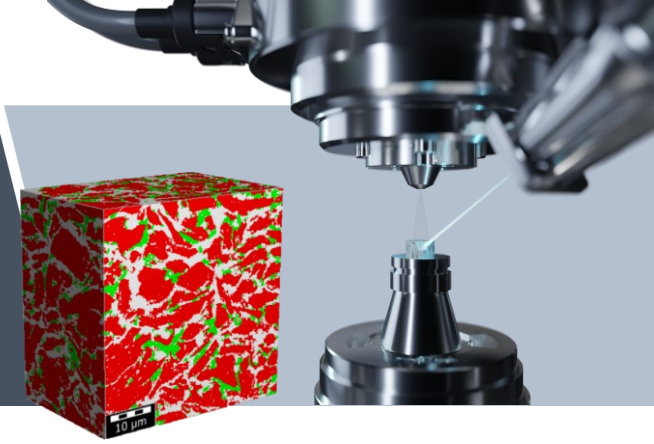
SCSK User Interview

リチウムイオン二次電池材料の解析とデジタルツイン構想

株式会社日産アーク様



昨今の、環境視点を意識したものづくりに欠かせない要素のひとつが材料技術です。株式会社日産アーク様は、日産自動車の研究開発部門で長年にわたり蓄積された材料の分析・解析技術を活かし、広く産業界に貢献するという企業理念のもと設立された材料分析会社であり、世界トップクラスの材料の分析・解析技術により、さまざまな材料開発コンサルティングサービスを提供され、自動車業界のみならずあらゆる産業界の課題解決に貢献しています。その高い分析技術を補い、さらに充実したサービスの提供を目指して、デジタル化を活用したものづくり支援に取り組まれていますが、その概要と活用事例のひとつとして「リチウムイオン二次電池材料の3D構造解析」をご紹介いただきます。

■ 導入前の課題

- SEM（走査電子顕微鏡）画像を数値化・定量化したい。
- 分析装置では困難な解析をシミュレーションで強化したい。
- パラメータスタディにより最適な条件の絞り込みをしたい。

■ 使用CAEソフトウェア

- 研究開発向け材料開発シミュレーション　GeoDict

貴社の事業やその対象分野を教えてください。

わたしたちは、自社で保有する各種分析装置を利用して、材料やプロセスに関わる特性・現象を正しく捉え、複雑な問題を解決するためのサポートを行っています。また、SPring-８等の大型放射光施設での量子ビーム計測や大型計算機を利用した第一原理計算など計算科学も取り入れています。例えば自動車を対象とした場合、部品点数が多く気温や路面状態など異なる環境下での利用が想定されるため、特に多くの課題があります。また近年では、電動化の加速により、自動車に関わる材料分析では電池が特に重要になっています。

株式会社日産アーク
分析・解析ソリューション企画推進部
部長　穐場　亨　様

日産自動車は電気自動車を世間に先んじて商用化し、わたしたちはその開発とともに分析技術を研究してきたアドバンテージがありますので、電池の分析を受けることは非常に多く、取引先からの依頼の4割程度を占めています。リチウムイオン電池の場合は劣化による膨張が問題となりますが、その原因となるガスの発生やそれに寄与する電解液の性質変化、電極の状態などを分析する必要があります。

もちろん電池が必要な性能を保持しているかも評価対象となり、さまざまな装置をフル活用する高難度な分析となります。これらを含め、今まで培ってきた経験と知識、そして幅広い課題要因を考慮した材料分析によってものづくりを支援しています。

その分析を補うために採用されたのが、GeoDictなのですね。

材料分析を進めるなかで3次元構造の数値化が求められることがあります。このような場合、SEM（走査電子顕微鏡）などの装置だけでは困難な場合もあります。そのため、画像取り込みと数値化、シミュレーションが一元的に実行できるGeoDictを数年前に導入しました。

以前から第一原理計算や分子動力学計算などのシミュレーションも行っていましたが、最近はマテリアル・インフォマティクスや、GeoDictによるシミュレーションを積極的に活用しています。図1はSEMによる断面画像と、その画像を取り込みGeoDictで3D可視化を行った結果です。このようにGeoDictを使うと、材料の各構成部材の分布も直感的に理解できるようになります。以前より難易度の高いＳＥＭ画像の数値化への要望が多かったのですが、それをGeoDictにより簡単に行えるようになりましたので、お客様に納得いただける形での提供が可能になりました。

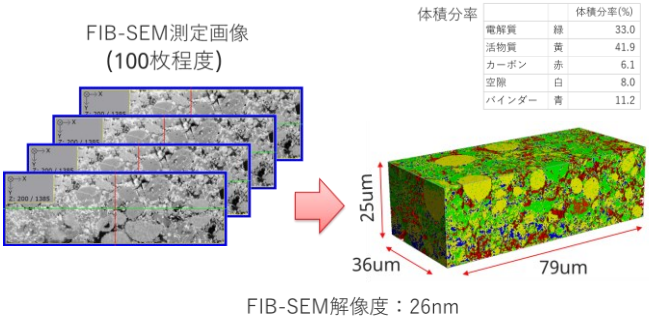


図1　SEM画像からGeoDictで活物質・電解質・助剤・バインダーの3D分布を可視化

こちらは、リチウムイオン電池の構成部材である、ポリエチレン（PE）をポリプロピレン（PP）で挟んだ三層構造のセパレータを解析した例です。図2はSEMでセパレータの断面画像を撮影したものですが、前処理として樹脂包埋や化学処理などを施すと濃淡がはっきりとした画像になります。黒色が空孔、薄灰色がPEもしくはPPとなります。この画像に映っている個々の空孔の大きさや分布状態、PE/PPの3次元的な構造を把握するため、GeoDictに取り込み3Dデータ化・数値化します。GeoDict側では、3D化の前に明るさの補正や加工痕の除去などを行うことができます（図3）。その後100枚程度集めた画像を積層し、3Dの材料モデルを作成して相対拡散係数を計算した結果が図4です。

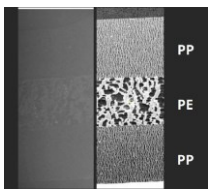


図2　左：前処理なし　右：前処理あり

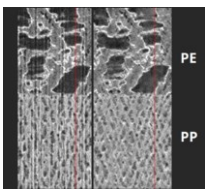


図3　GeoDict画像処理　左：なし　右：あり

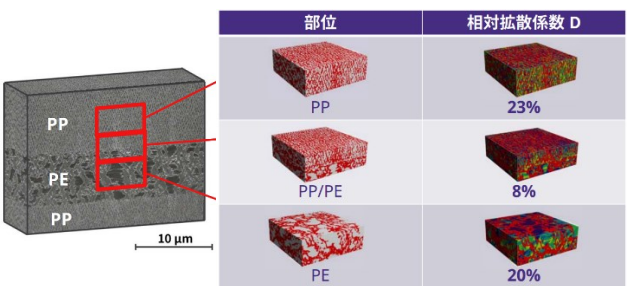


図4　二値化画像から3D構造を作成し相対拡散係数を計算

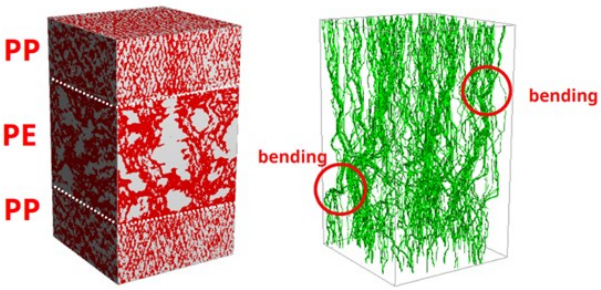


図5　パーコレーションパスの解析によりネットワーク構造を可視化

また、図5のようにパーコレーションパスを解析することで、PP/PE接合面の構造が拡散に影響することを視覚的に捉えるとともに、数値化することが可能です。ここまでの作業は、これまで培ってきた分析技術とGeoDictとの合わせ技でないとできません。

GeoDictの利用により業務効率化やサービスの質向上でどれくらい効果があったのでしょうか。

株式会社日産アーク
分析・解析ソリューション企画推進部
齋藤　憲男 様

例えば完成電極の構造の3D化は、GeoDictがなかったらできません。他のツールでも試してみましたが、GeoDictの方がはるかに作業効率が良く、絶対的に速いです。特に操作性が優れていて、GUIはもちろん画像変換などさまざまな機能がまとまっていてレベルが高く、大変使いやすいと思います。しかもその後のシミュレーションまで一気通貫で実施できるのは他にはあまりないですから、GeoDictから他のツールに移れるかというと、移るものがないです。

また、バージョンアップでの機能追加も早く、こちらの要求にあった機能が次のバージョンには入ることが多いので助かっています。GeoDictはパラメータスタディの機能も充実しているので、最適な条件を絞り込み材料設計にフィードバックすることで、分析だけでは実現できなかった世界もカバーできると自負しています。ここはまさにデジタルツインの領域ですが、これからはデジタルツインを意識した材料検討が増えてくると考えています。

デジタルツインにはどのように取り組まれていらっしゃいますか。

現在は、観察や分析を起点にシミュレーションに繋げて現象の数値化を行うことが多いですが、今後はデジタルツインを活用したパラメータスタディによる材料開発の支援も進めていきたいと思います。そこでポイントとなるのが、多様なパラメータによるリアルなモデル化です。実際の電池の電極は、粒子の形が規則正しくはないので、それを模してどこまでリアルにモデル化し、実物の現象と相関をとれるかが勝負ではないでしょうか。

今でも、GeoDictで粒子形状や粒径頻度を指定したモデル化とシミュレーションは可能ですが（図６）（図７）、それをさらに実物に近い精度のモデルで行えたら理想的です。また画像からの3D構造の再構築についても同様に、現物に忠実なモデル化という点で、GeoDictのAI機能にも期待しています。撮影条件によってズレが出るような画像の補正や予測などにAIが活躍するでしょうし、そのために必要となる膨大な計算処理を最新のハードウェアの活用で現実的なレベルにもっていきたいと思います。

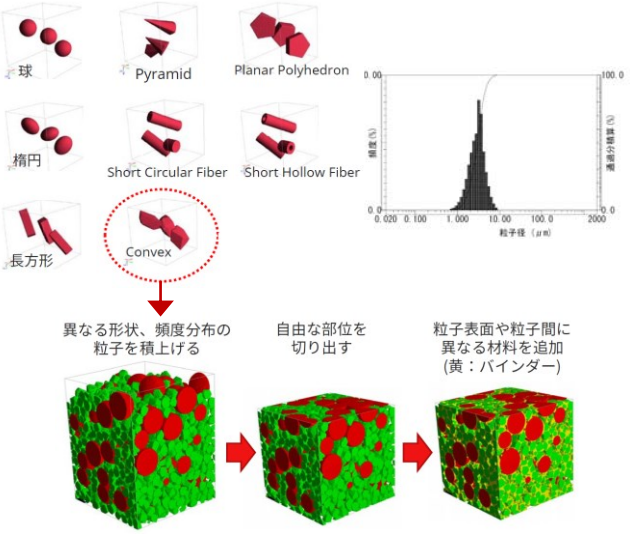


図６　GeoDictで形状パラメータを指定しモデル化

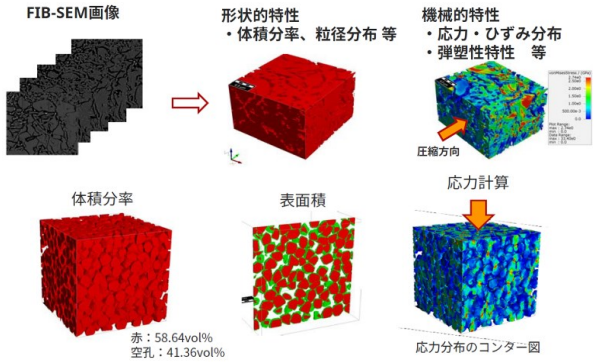
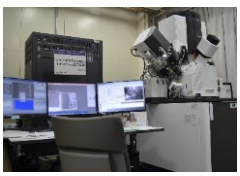


図７　GeoDictで取り込んだ３D画像モデルや仮想生成モデルでシミュレーションを実施

この度はGeoDictの活用事例についてご紹介下さいましてどうもありがとうございました。材料開発のデジタルツインを、SCSKとしても全面的にバックアップしていけるよう努めてまいります。

お客様紹介



株式会社日産アーク

設立：1990年12月17日

事業内容：リチウムイオン二次電池、全固体電池、燃料電池、金属材料、有機材料、機械物性、劣化・故障・異物、VOC・臭気、パワーエレクトロニクス、シミュレーション・新規材料開発などの材料・プロセスに関わる、様々な特性・現象の把握と問題解決を高度な材料分析技術、解析技術でサポート

https://www.nissan-arc.co.jp/

GeoDictの製品情報はこちら：　https://www.scsk.jp/product/common/geodict

記事制作（取材日：2022年7月27日）：SCSK株式会社 製造エンジニアリング事業本部　芝祥郎、染谷和、大貫 智寛、近藤晶子

SCSK株式会社　製造エンジニアリング事業本部　プロダクト推進部　E-mail: eng-sales@scsk.jp　Tel: 03-5859-3012

本文に記載の会社名、部署名、製品名などの名称は、取材日時点のものです。
SCSK株式会社に事前の承諾を得ることなく、本記事の全部または一部を使用（複製・改ざん・頒布・送信・上映）することを禁止します。
また、ダウンロード、プリントアウトされた複製物を、不特定または多数の人へ送信・配布することはできません。