

# インターンシップ報告書

工学系研究科物理工学専攻田中研究室  
4期生 石野誠一郎

インターン先	株式会社日産アーク
部署	デバイス解析部
実習期間	平成 29 年 10 月 16 日 (月) – 平成 29 年 12 月 15 日 (金)
実施テーマ	電極界面のシミュレーション

## 背景

現在、電気自動車のさらなる普及のために、リチウムイオン二次電池の安全性と出力密度の向上が強く求められている。開発が進められつつある全固体リチウムイオン電池は、電極だけでなく電解質にも固体を用いた電池である。液漏れの心配がなく、材料の揮発性も低いため、発火の危険性は非常に低い。また、セパレータが不要になるので、出力密度の向上も期待できる。これらの利点を有する全固体電池を利用して、安全で航続距離の長い電気自動車を実現するための研究が、世界各国の自動車メーカーで行われ始めている。

本インターンシップでは、全固体リチウムイオン電池の負極–電解質複合系に対して、第一原理計算を利用した研究を行った。全固体電池で一般に問題になるのは、イオン伝導度や、電圧印加時の材料の安定性などである。これらの性質を個々の材料について調べることも重要であるが、電池が常に複数の材料の複合系であることを考えれば、バルクだけでなく表面、界面における特性も同様に重要になる。しかし固体同士の界面を *in situ* で詳細に観測することは容易でなく、実空間での観察を得意とするシミュレーションが果たし得る役割は大きい。

## 研究の内容と成果

日産アークで実際に利用されているソフトウェアや計算コードの使用法を、インターンシップ期間中に習得しつつ研究を行った。まずはモデリング・シミュレーションソフトウェアを用いて計算モデルを構築した。次に第一原理計算プログラムパッケージによって構造最適化、分子動力学計算を行った。

計算結果を解析したところ、負極材料の選択によって、界面における構造や化学反応の速度が大きく変化することが判明した。ある材料では、イオン伝導度低下の原因となる固体-電解質中間相の前駆体が生成されていた。界面上の原子の電荷や電子状態密度を解析することで、静電気力や分子軌道の観点からこのような変化の原因を明らかにした。

## 所感

今回のインターンシップで最も有意義だったのは、実力ある社員の方々と議論を深めることができたことだった。博士課程やポスドクに進んだ方々が企業でも活躍している姿を直接見ることができたことは、大きな励みになっただけでなく、今後のキャリアにおいてアカデミアか企業かという違いにあまりこだわらず進路を模索していこうと考えるきっかけになった。また、博士課程で行っている古典系のシミュレーションに加えて、今回量子系の計算技術を習得できたことで、将来の進路の幅が大きく広がったのではないかと感じている。

## 謝辞

二ヶ月にわたるインターンシップ期間中、株式会社日産アークの大脇様、Duy 様、池庄司様をはじめとする方々には大変お世話になりました。また、受け入れ先の紹介や、実施期間中の宿泊先の調整などに尽力して下さった計算物質科学人材育成コンソーシアム (PCoMS) 事務局にも大変感謝しております。最後になりますが、大学院生活の支援を受けております統合物質科学リーダー養成プログラム (MERIT) にも深く感謝しております。