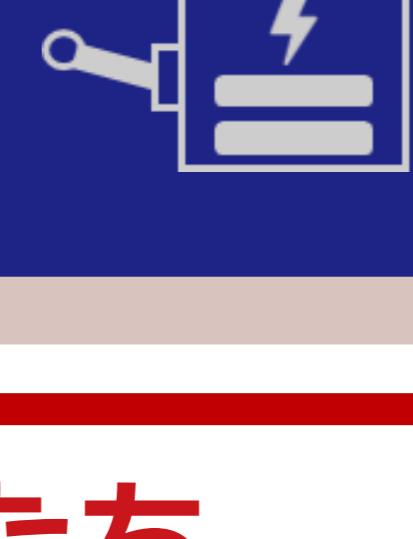


# Designing the Future of Li-S Batteries through Computation

## 計算によってLi-S電池の未来を設計する

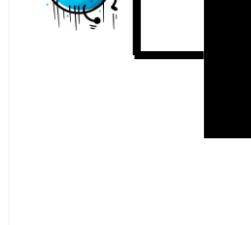
Kaewraung Wongsathorn

北海道大学 大学院総合化学院



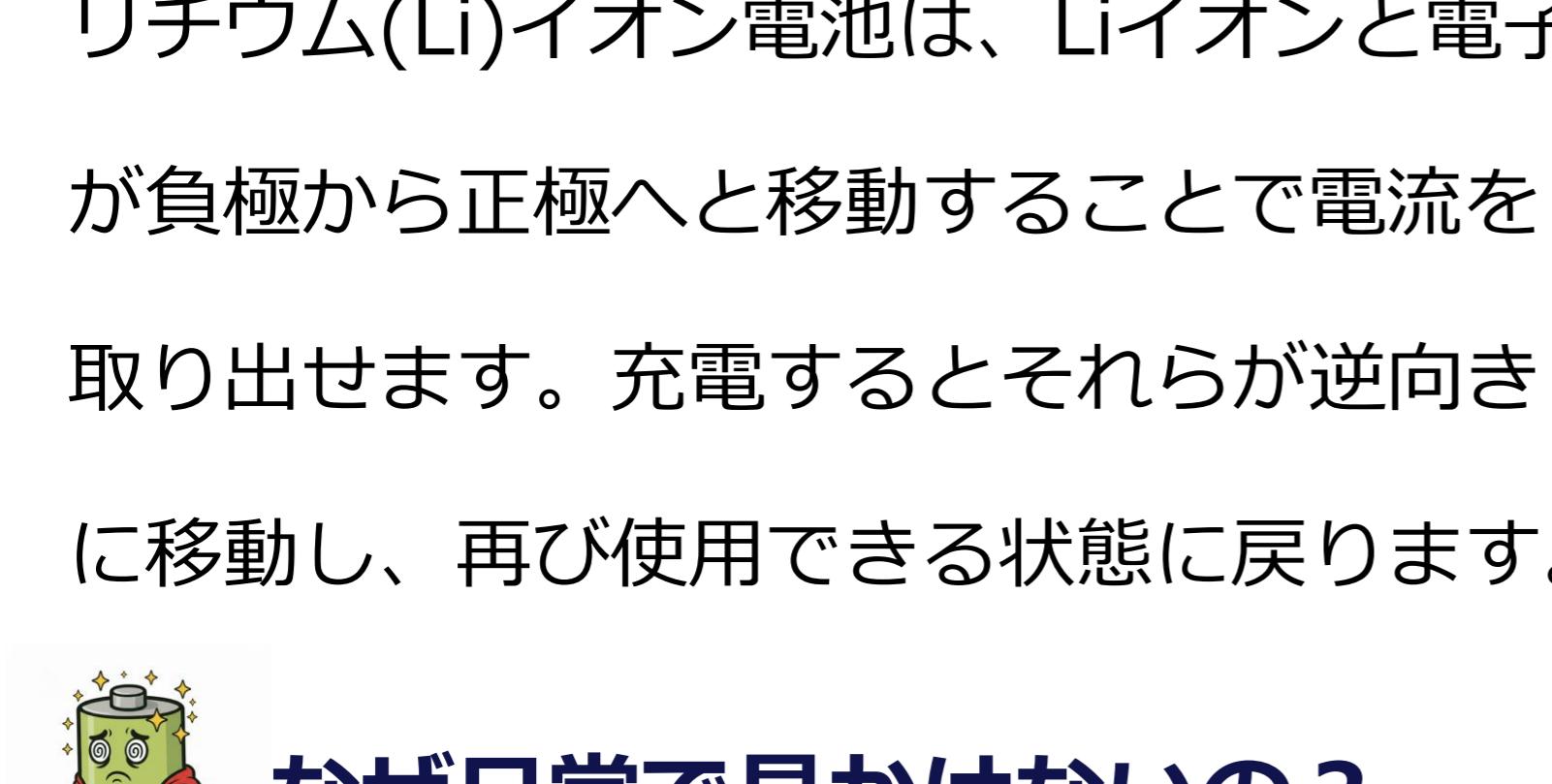
### 未来社会のあるべきかたち

- エネルギー貯蔵のための材料開発の加速
- Liイオン電池をLi-S電池に置き換える
- 化石燃料を100%電力に置き換える



リチウム硫黄電池とは何か?

どのような仕組み?



リチウム(Li)イオン電池は、Liイオンと電子

が負極から正極へと移動することで電流を

取り出せます。充電するとそれらが逆向

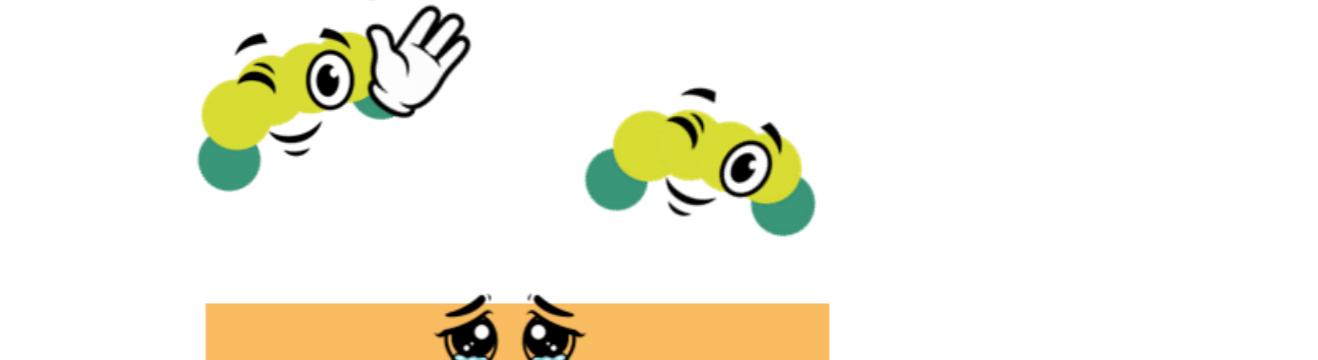
に移動し、再び使用できる状態に戻ります。

Li-ion batteries



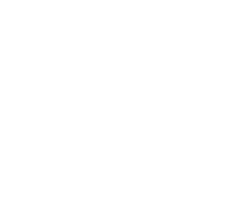
リチウムの受け渡しによって取り出  
せるエネルギーは限られています。

Li-Sulfur batteries

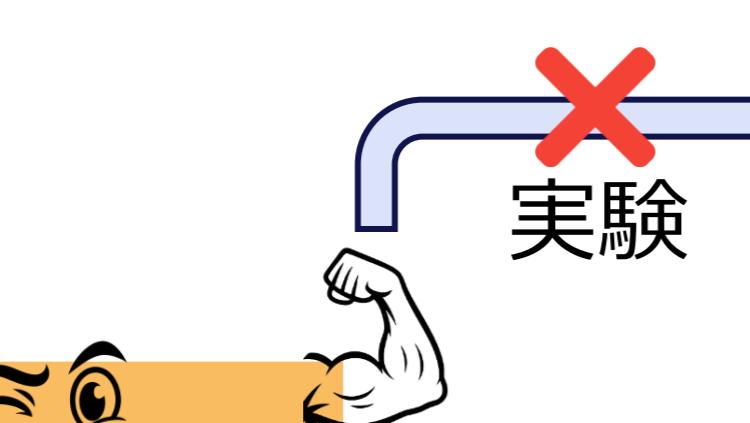


S

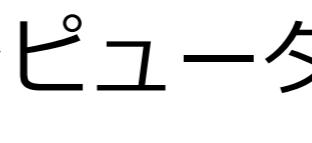
エネルギーは6倍になります！



なぜ日常で見かけないの?



Bye!



1. LiとSは反応しにくい

2. 正極とLi-Sの弱い相互作用

この問題をどのように解決するか?



実験

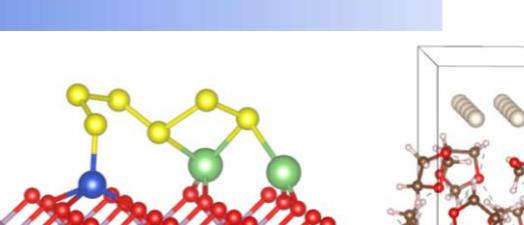


高コストで時間のかかる材料開発

コンピューターを用いて計算!!

高性能な正極材料の探索!!

計算



新材料を数倍速く発見!!

interaction with single electron

私たちの研究は?

正極にはどの

金属が最適?

シミュレーションで比較

最適な金属を見つけ、

実験を行う!

正極にはどの

金属が最適?

シミュレーションで比較

最適な金属を見つけ、

実験を行う!