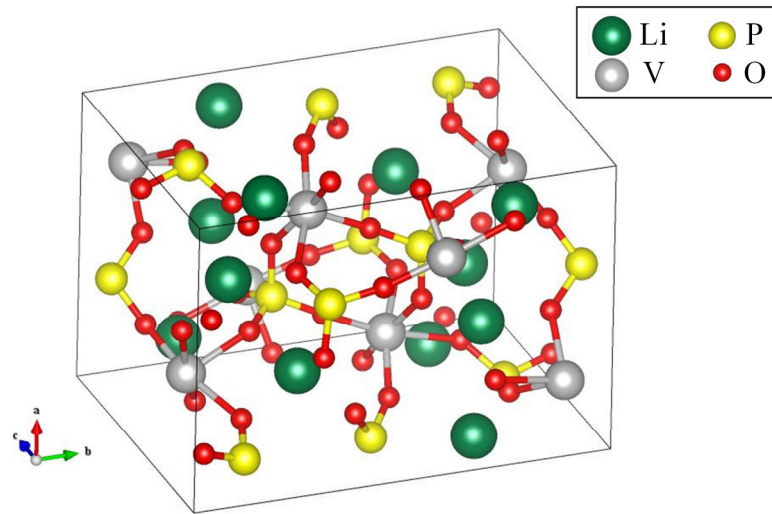
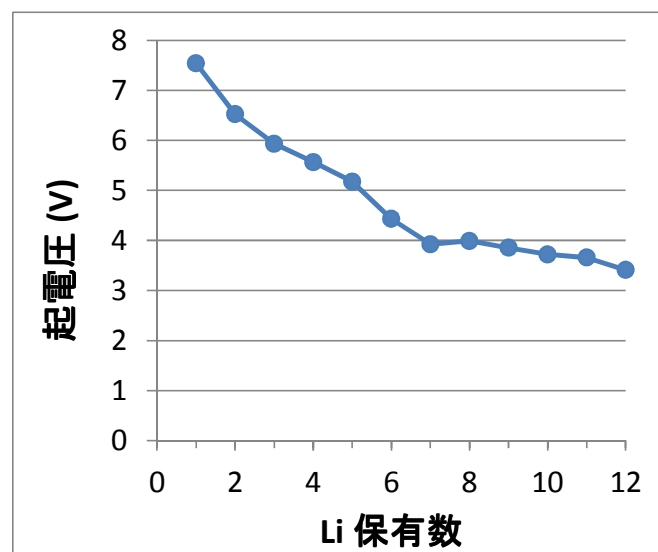
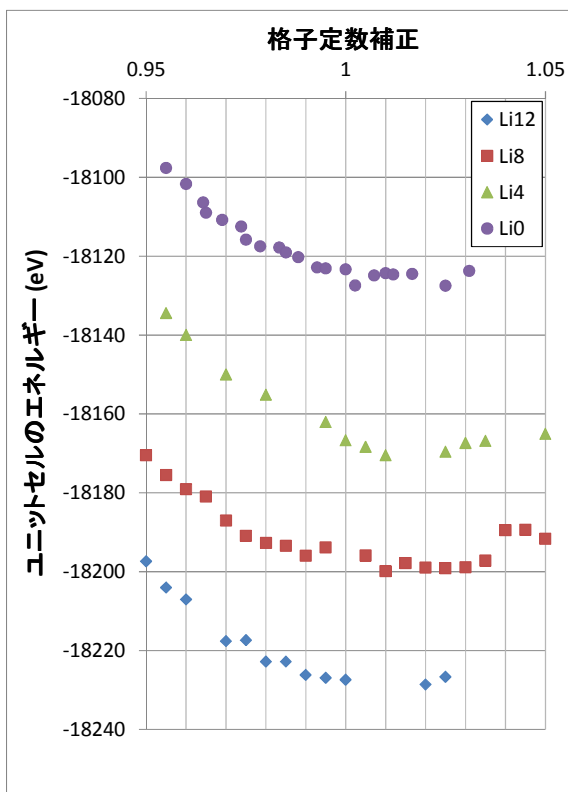


## リチウムイオン電池起電力計算シミュレータの計算事例

計算サンプルとして  $\text{Li}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  のユニットセルを下に示す。全 80 原子のうち Li は 12 原子含まれる。



Li 原子が一つ抜けるたびにユニットセルの格子定数の最適化を行う。格子定数を変化させ、最も安定となるときのエネルギーを見出す。



結晶が保有する Li 原子数により系の全エネルギーが変化する。これにより放電時の起電圧を求めることができる。

本シミュレータは、このような計算を自動的に実行する。