

リチウムイオン二次電池(LIB)正極材料の電子構造及び局所構造解析

XAFS解析による正極材料の価数・配位数・原子間距離の評価

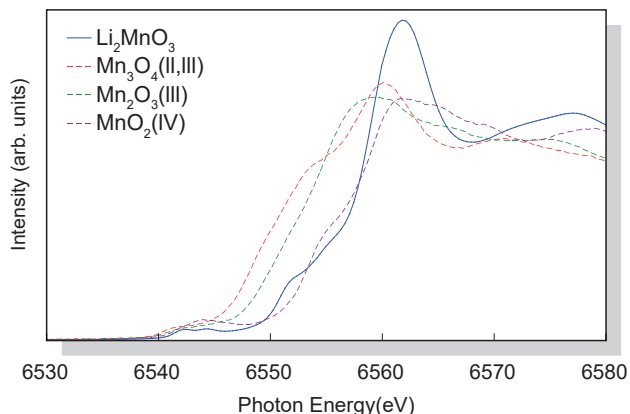
測定法 XAFS
 製品分野 二次電池
 分析目的 化学結合状態評価・構造評価

近年、ハイブリッド自動車(HV)や電気自動車(EV)が普及しつつある中で、その電源利用のために、リチウムイオン二次電池(LIB)の大型化・高性能化が求められています。

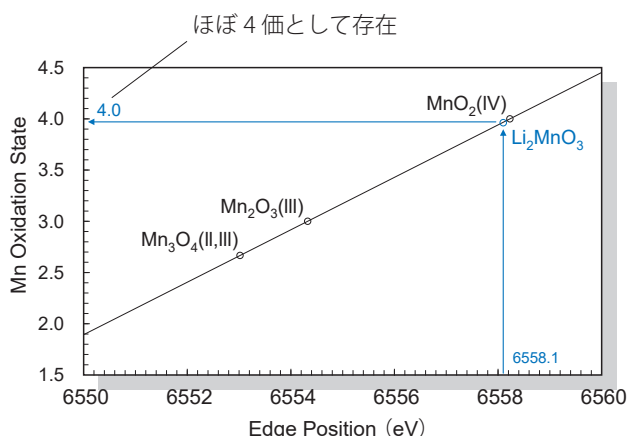
高容量正極材料を開発するためには、その組成-構造-電気化学特性の相関関係を見出すことが非常に重要です。正極材料について、金属元素の電子状態およびその局所構造を、放射光を用いたXAFS解析によって明らかにすることで、その組成-構造-電気化学特性の相関関係に関する知見を得ることができるため、高容量・高耐久な正極材料開発に活用することが可能です。

データ

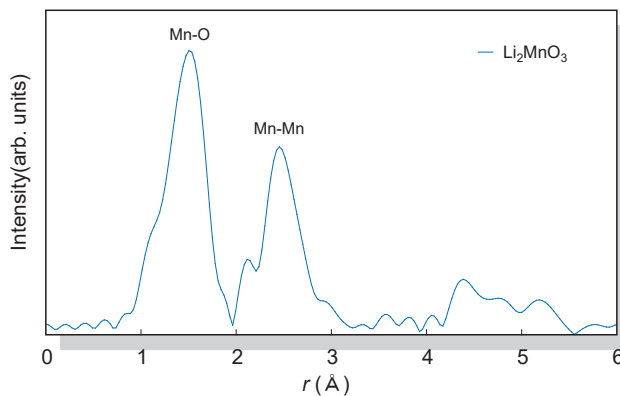
Mn-K端 XAFSスペクトルより、リチウムイオン二次電池 (LIB) 正極材料の電子構造及び局所構造解析を行った事例を紹介します。



(図1) Li_2MnO_3 , Mn_3O_4 , Mn_2O_3 , MnO_2 の Mn-K 端 XANES*スペクトル
 ※X-ray Absorption Near Edge Structure



(図2) 吸収端立ち上がり位置からの Mn 価数評価



(図3) Li_2MnO_3 の Mn-K 端フーリエ変換 EXAFS*振幅
 ※Extended X-ray Absorption Fine Structure

表1 Li_2MnO_3 の局所構造パラメータ

試料	配位	$r(\text{Å})$	N
Li_2MnO_3	Mn-O	1.91	6

