

# 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**

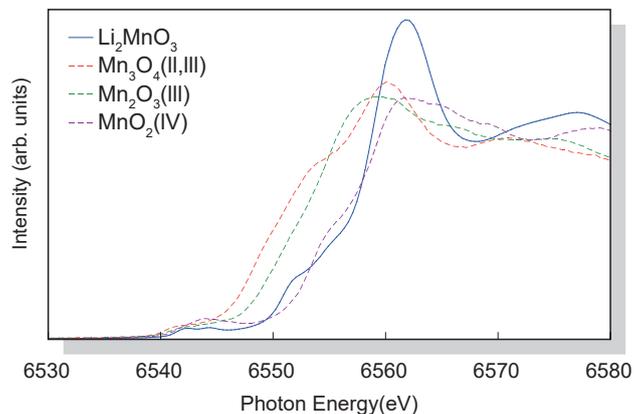
測定法 XAFS  
 製品分野 二次電池  
 分析目的 化学結合状態評価・構造評価

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。

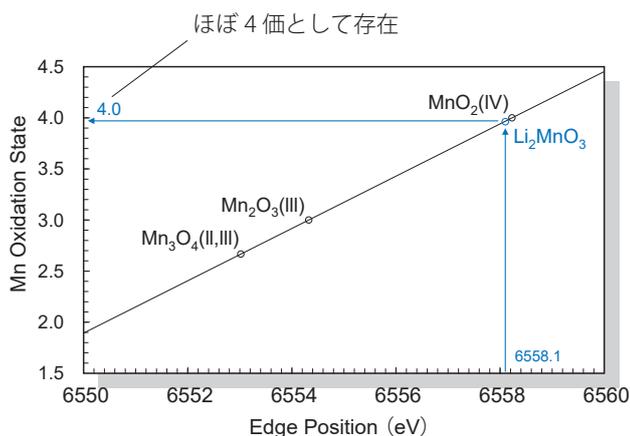
高容量正極材料を開発するためには、その組成-構造-電気化学特性の相関関係を見出すことが非常に重要です。正極材料について、金属元素の電子状態およびその局所構造を、放射光を用いたXAFS解析によって明らかにすることで、その組成-構造-電気化学特性の相関関係に関する知見を得ることができるため、高容量・高耐久な正極材料開発に活用することが可能です。

## データ

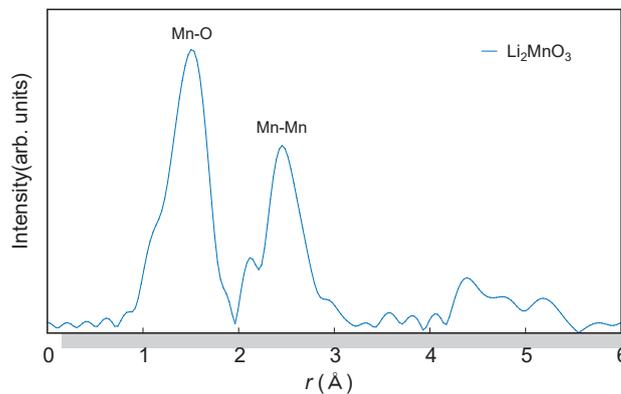
Mn-K端 XAFSスペクトルより、リチウムイオン二次電池 (LIB) 正極材料の電子構造及び局所構造解析を行った事例を紹介します。



(図1)  $\text{Li}_2\text{MnO}_3$ ,  $\text{Mn}_3\text{O}_4$ ,  $\text{Mn}_2\text{O}_3$ ,  $\text{MnO}_2$  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)  $\text{Li}_2\text{MnO}_3$  の Mn-K 端フーリエ変換 EXAFS\*振幅  
 ※Extended X-ray Absorption Fine Structure

表1  $\text{Li}_2\text{MnO}_3$  の局所構造パラメータ

試料	配位	$r(\text{Å})$	$N$
$\text{Li}_2\text{MnO}_3$	Mn-O	1.91	6

