



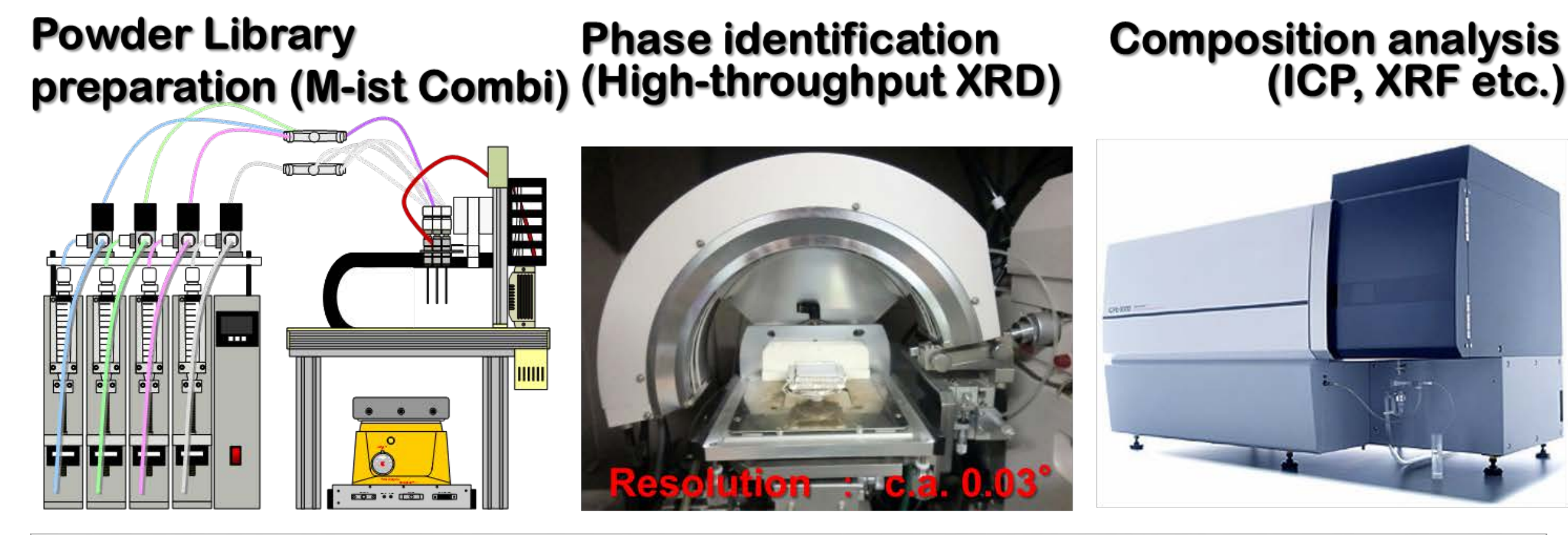
# コンビナトリアル技術による放射光を利用したリチウム電池用正極材料の高速スクリーニング

藤本憲次郎<sup>1</sup>・南部公平<sup>1</sup>・吉村真実<sup>1</sup>・滝沢和哉<sup>1,2</sup>・  
佐藤吉宣<sup>2</sup>・山本信雄<sup>2</sup>・伊東真一<sup>2</sup>  
<sup>1</sup>東京理科大学・<sup>2</sup>株式会社デンソー

## 背景

本研究は、リチウムイオン電池用正極材料について、構造と物性の相関を精査しつつ、着目されつつあるマテリアル・インフォマティクスの要となる高速評価技術の構築を目指した。

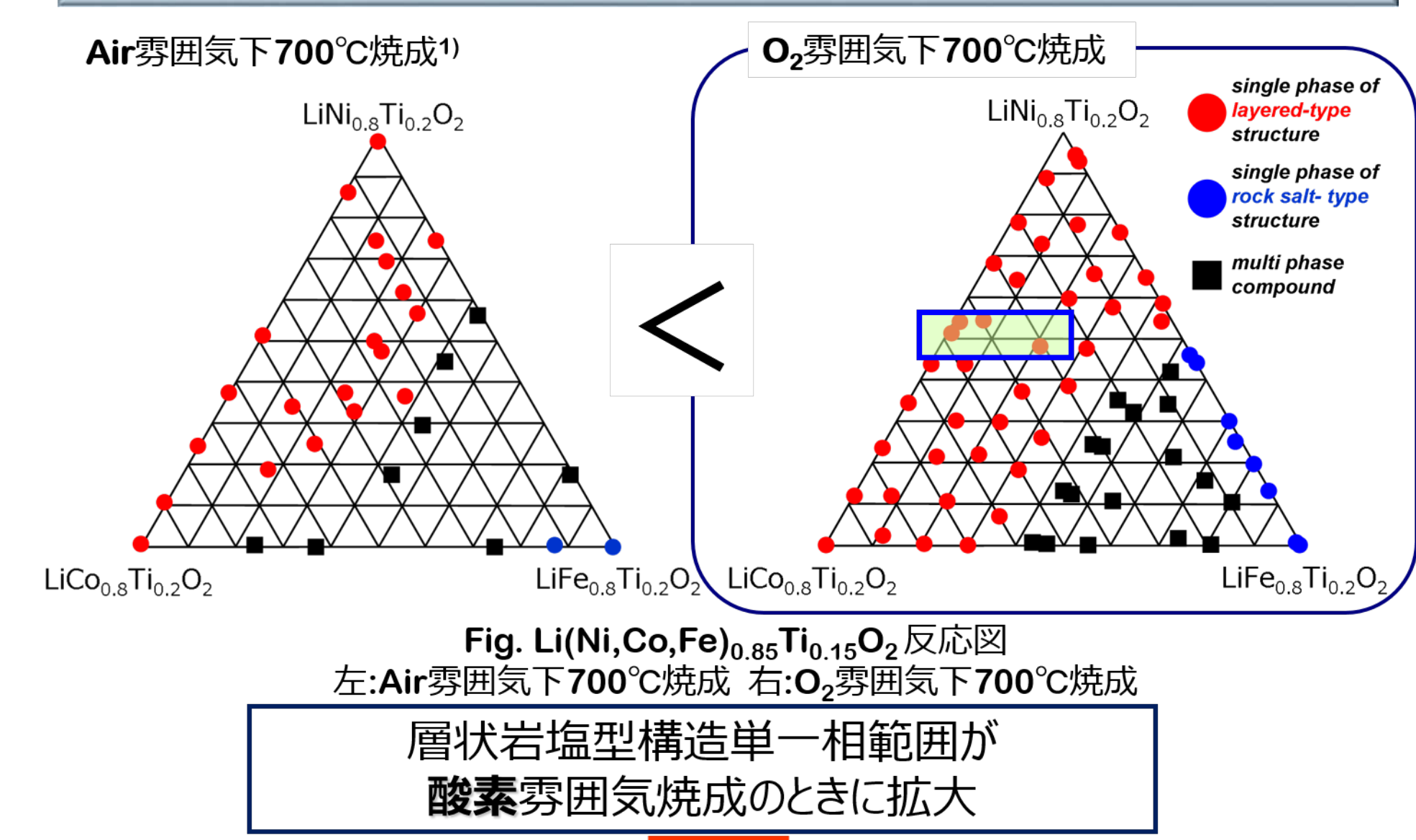
リチウムイオン電池正極材の対象となる構造のなかで、層状岩塩型およびスピネル型結晶構造を有する多元系複合酸化物に着目し、右図のようなコンビナトリアル技術等を駆使して見出した新規候補材料について放射光回折・XAFSにより詳細な構造の評価を行った。



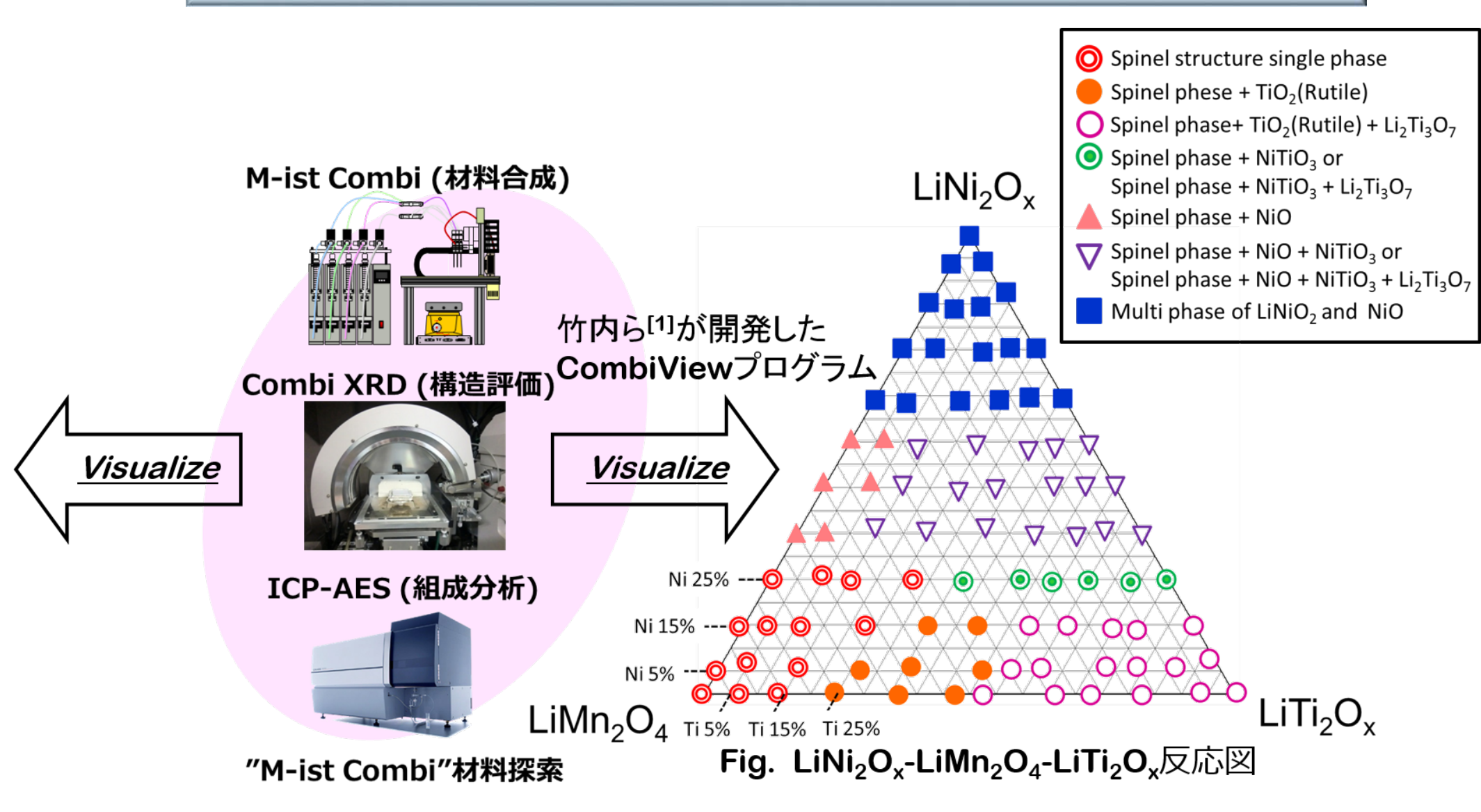
構造や組成から多元系反応図を構築し、構造と物性の詳細な相関を導くために放射光データが必要

## 結果・考察

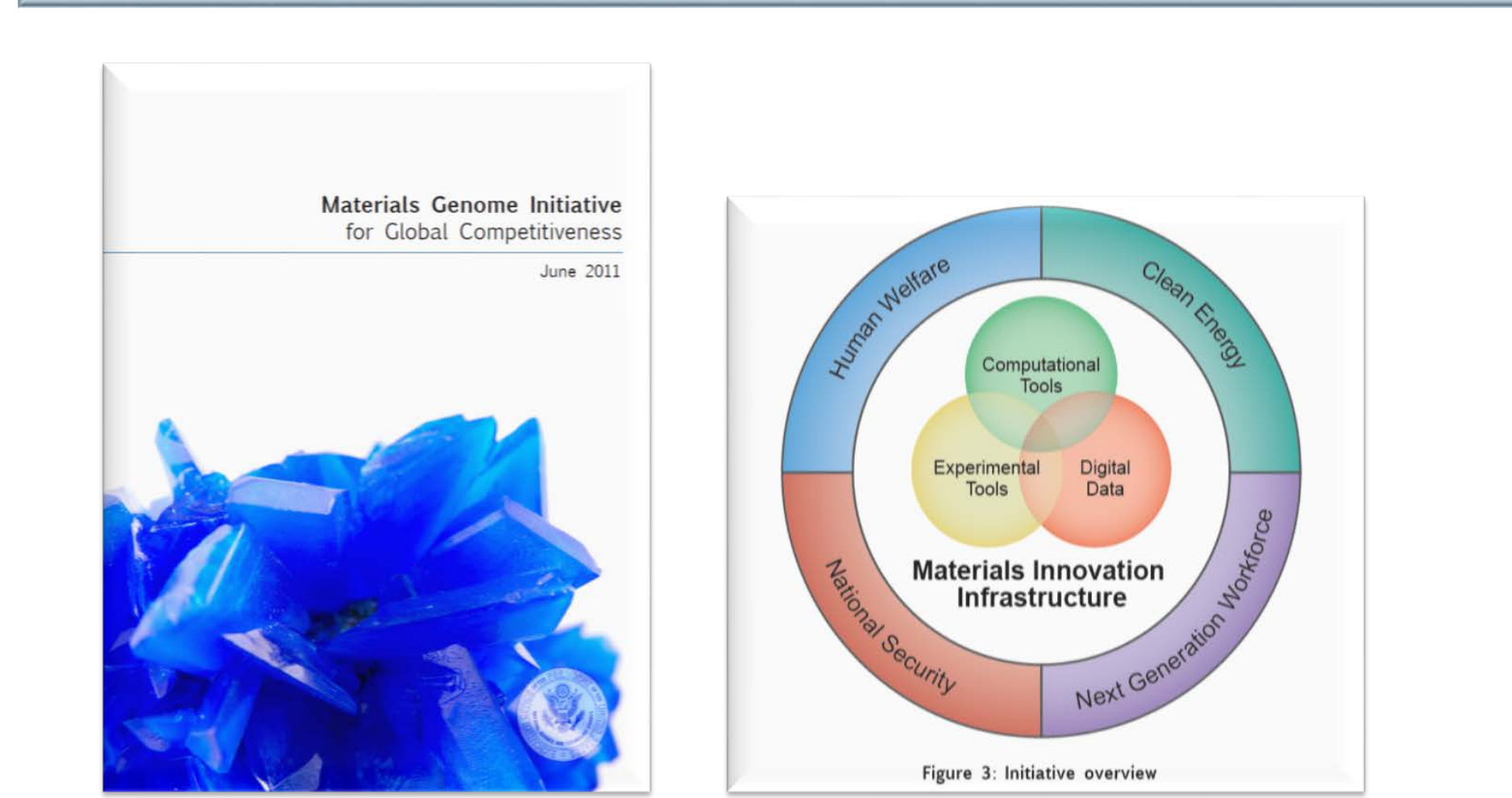
### 層状岩塩型Li(Ni,Co,Fe,Ti)O<sub>2</sub>系



### スピネル型Li(Ni,Ti,Mn)O<sub>2</sub>系

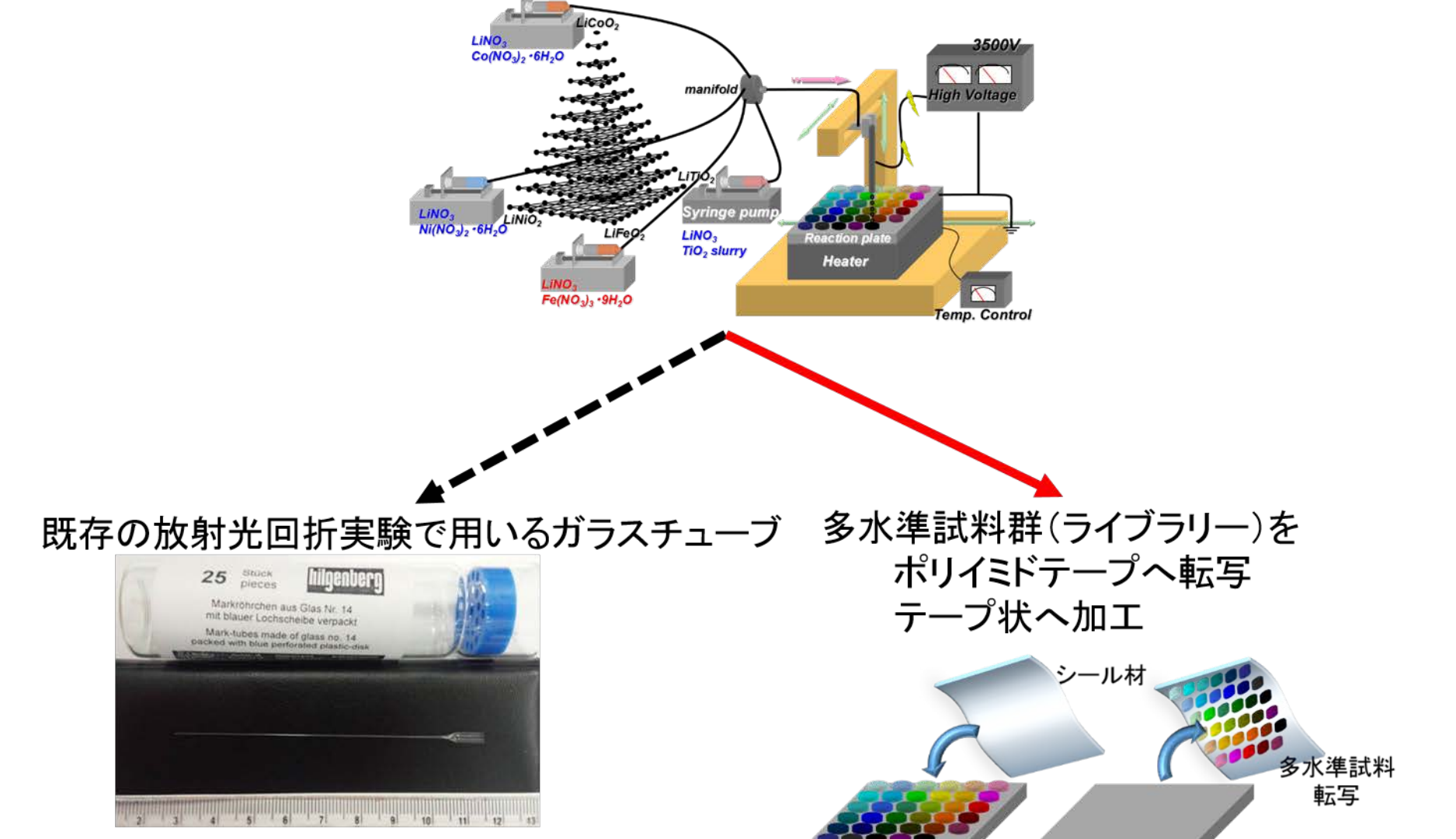


### X線回折データ収集法の検討

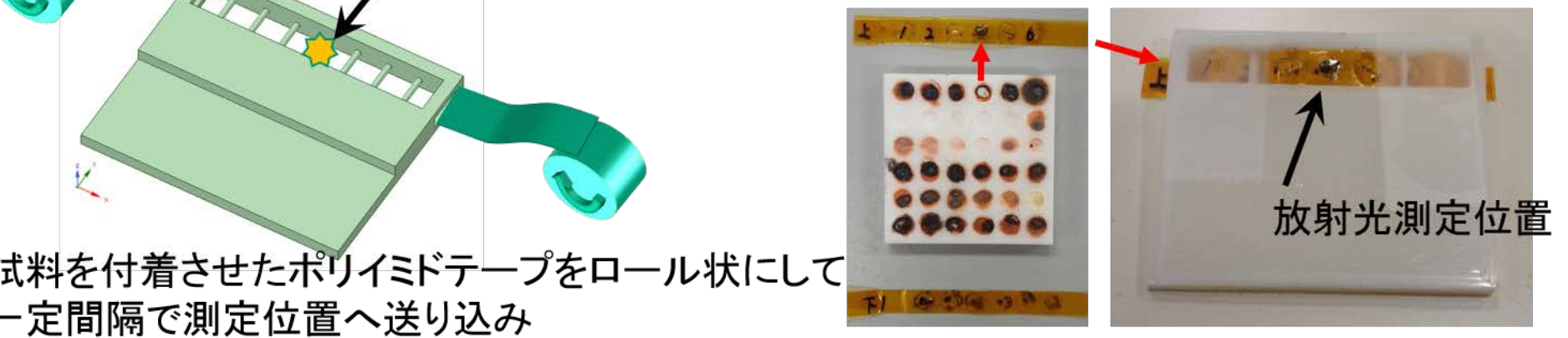


Materials Genome Initiative (MGI) 「計算科学ツール」「データベースツール」「材料高速合成・評価ツール」の構築・融合が多成分系材料の高速材料探索に必要

マテリアルインフォマティクスへの展開へ向けて粉体の放射光測定をより効率化できないか... 材料高速合成システムの概念図



放射光簡易測定装置の概念図 写真左: ライブラリーをポリイミドテープへ転写 写真右: 試料測定位置へ実試料を設置した状態



あいちシンクロtron光センター BL5S2 放射光回折データ 上: マンガン酸リチウム(電池材料) 下: α-アルミナ(NIST標準試料)

O<sub>2</sub>雰囲気下700℃焼成によるLiNi<sub>0.4</sub>Co<sub>0.4-y</sub>Fe<sub>y</sub>Ti<sub>0.2</sub>O<sub>2</sub>のスケールアップ

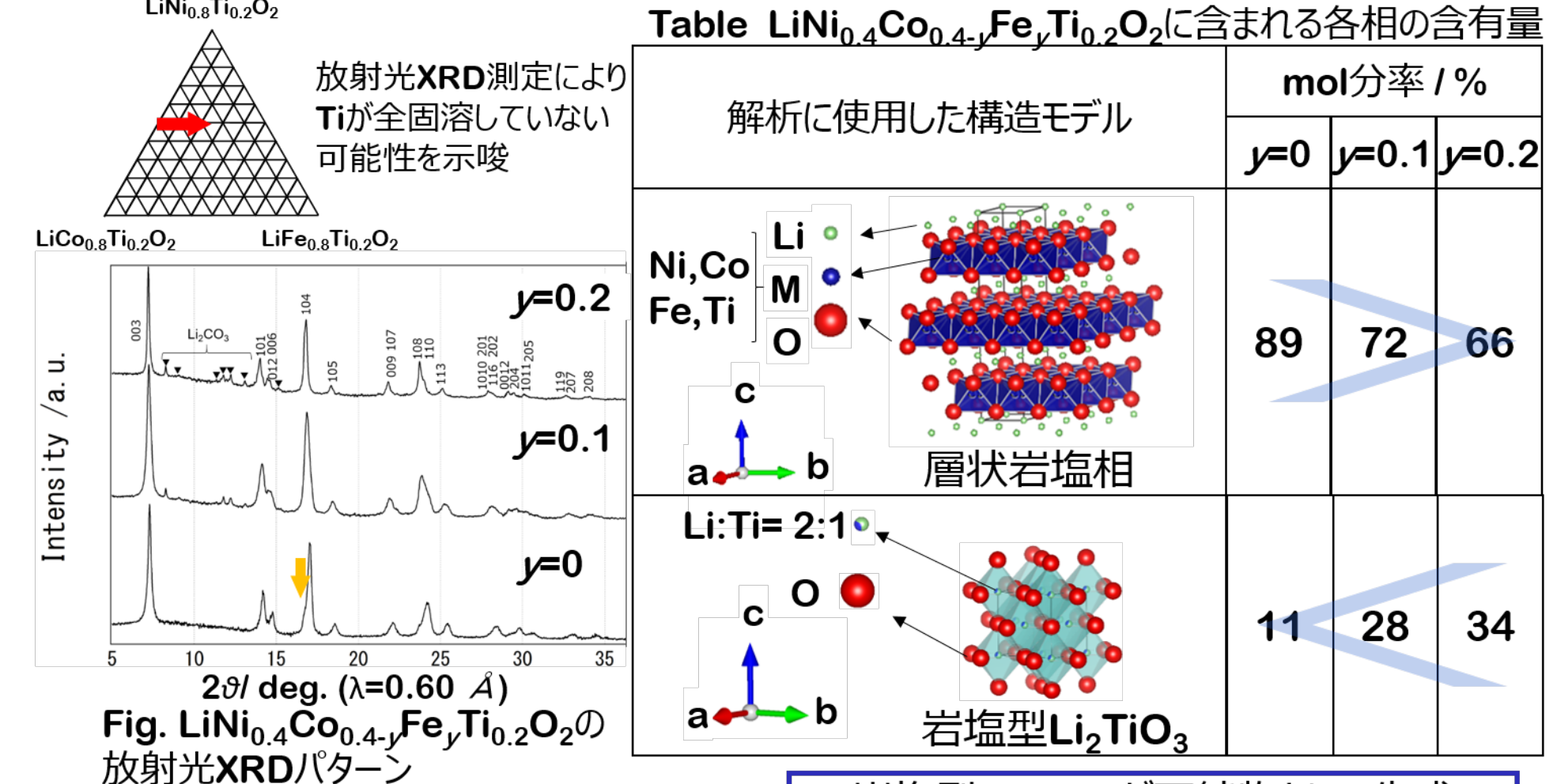


Table LiNi<sub>0.4</sub>Co<sub>0.4-y</sub>Fe<sub>y</sub>Ti<sub>0.2</sub>O<sub>2</sub>に含まれる各相の含有量

組成	mol分率 / %
y=0	89
y=0.1	72
y=0.2	66

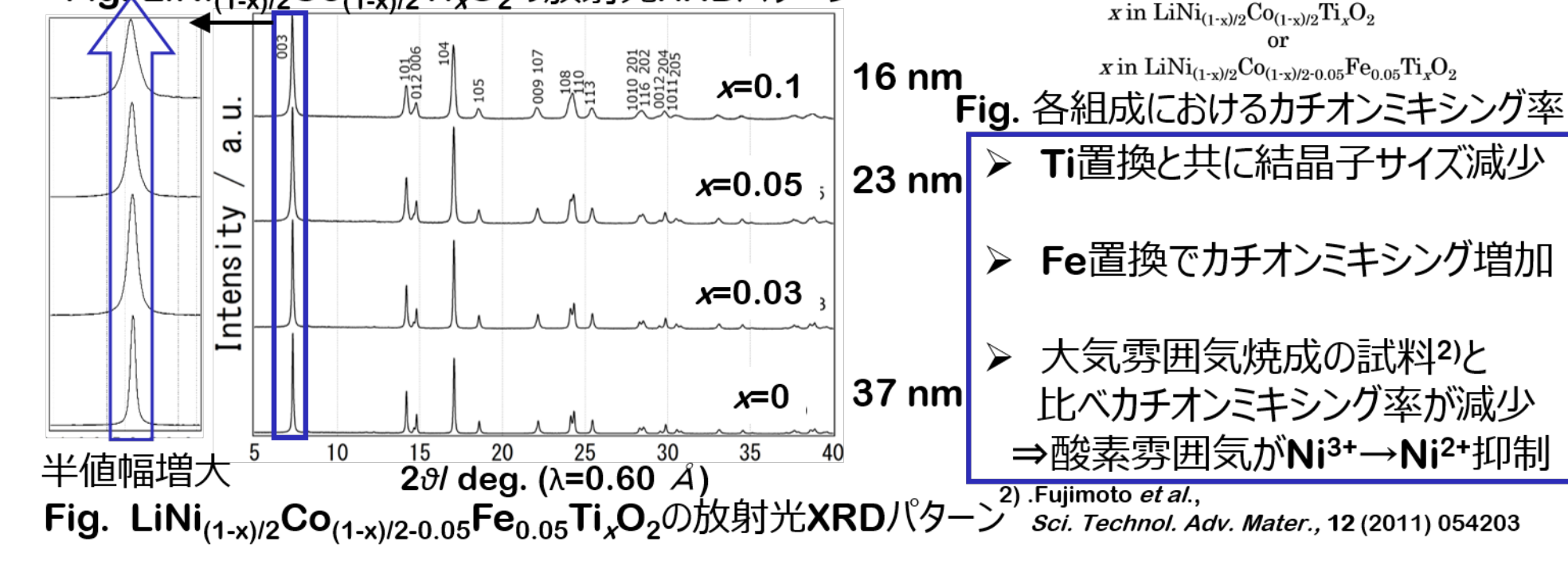
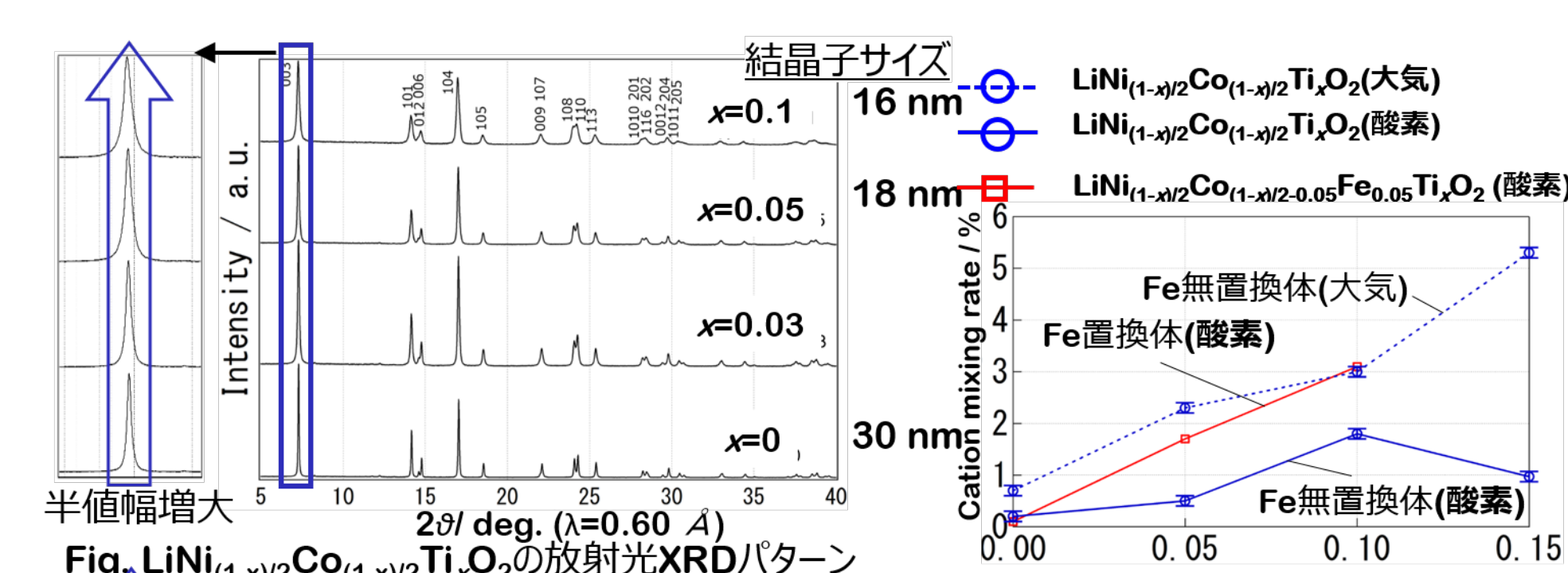
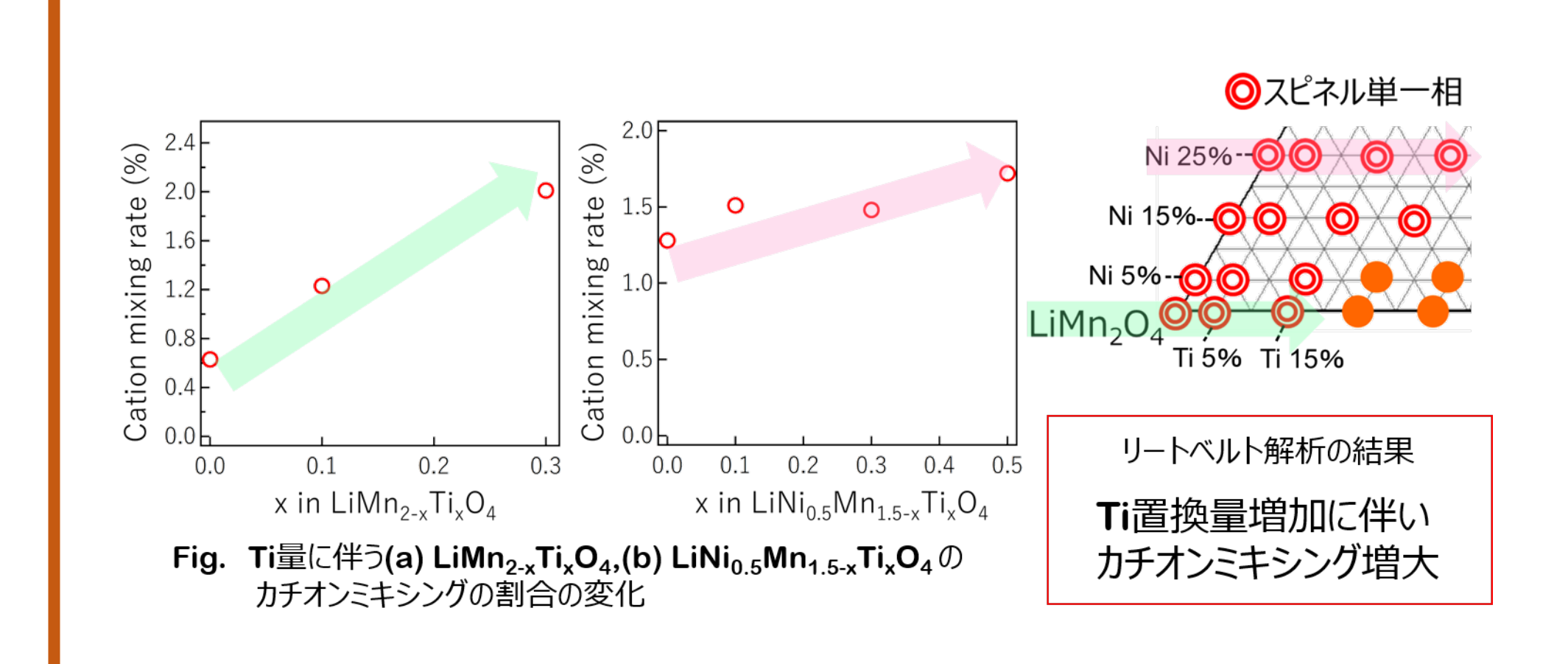
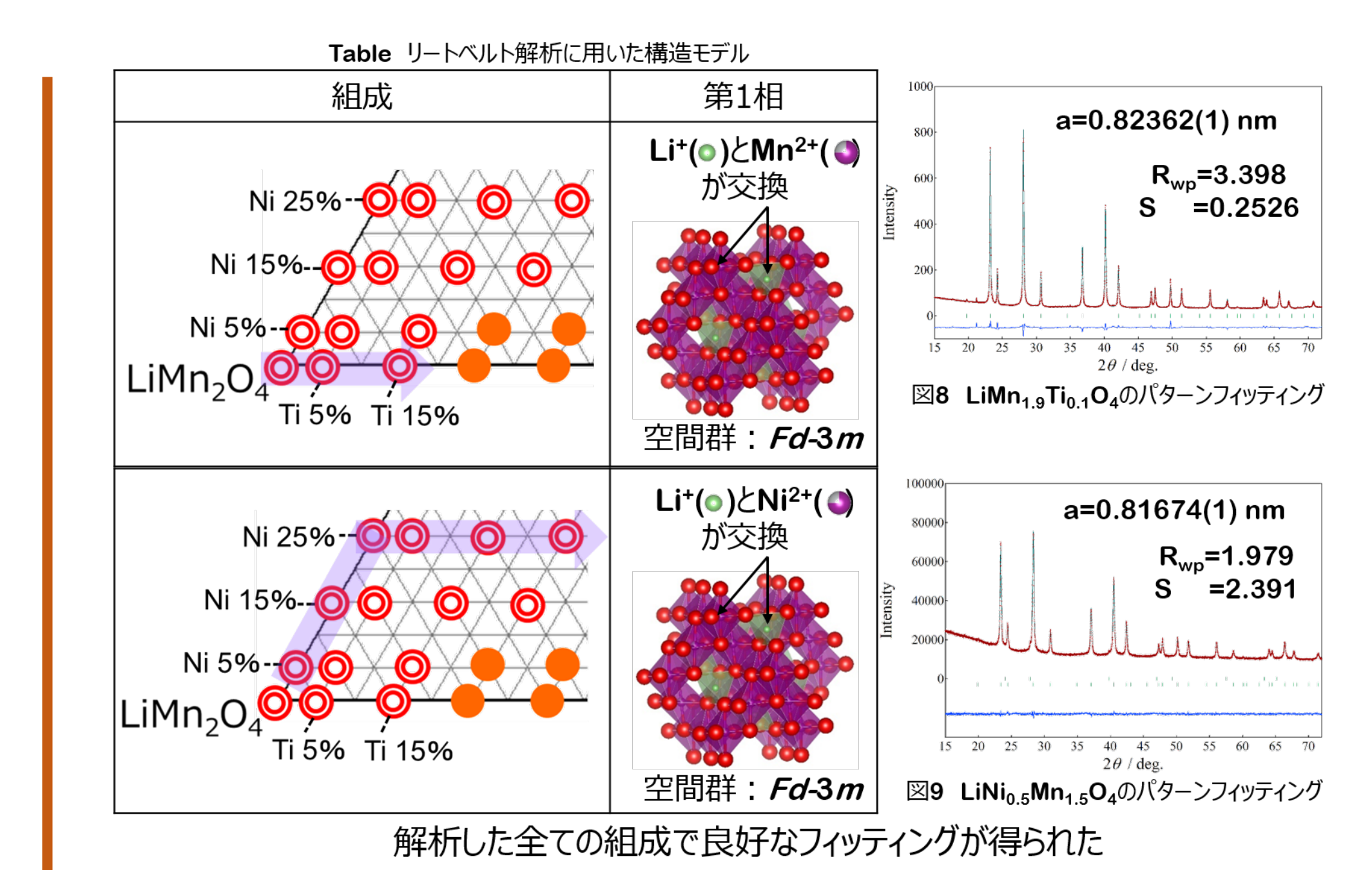


Table LiNi<sub>0.4</sub>Co<sub>0.4-y</sub>Fe<sub>y</sub>Ti<sub>0.2</sub>O<sub>2</sub>各元素の平均価数

組成	Ni	Co	Fe	平均価数
y=0	2.8	3.0	-	0.88
y=0.1	2.9	3.0	3.0	0.84
y=0.2	2.9	3.0	3.0	0.84



### 期待される効果

- 層状岩塩型では、これまでに層状岩塩型の単一相としていた物質に、実際には岩塩型構造が第二相として含まれていたこと、スピネル型では酸素欠陥の有無や遷移金属サイトの価数が明確になった。
- また、材料評価と並行して、回折に用いるキャピラリーを用いることなく、より簡便に回折測定を行う治具開発を行い、次のステップに繋がる成果を得た。