



# 酸化物系全固体蓄電池材料の結晶構造解析

山本 貴之

名古屋大学大学院工学研究科

キーワード：全固体リチウム二次電池，電極活物質

## 1. 背景と研究目的

スマートフォンやラップトップ PC に用いられるリチウムイオン電池では、高いエネルギー密度が求められるため、高い酸化還元電位（約 4 V vs  $\text{Li}^+/\text{Li}$ ）を持つ  $\text{LiCoO}_2$  などの正極材料が用いられている。近年では腕時計型端末や眼鏡型端末など、人が身につける電子デバイスが普及しており、より安全性の高い電池が求められる。さらなる IoT 社会の発展に向けて、適材適所な電池設計が必要であり、多種多様なニーズに対応するための材料開発が必要になる。 $\text{Fe}_2(\text{MoO}_4)_3$  は酸化還元電位が約 3 V vs  $\text{Li}^+/\text{Li}$  であるが、サイクル安定性が高い、充放電時の体積変化が小さい、原材料費が安価であるといった特徴を有している<sup>1</sup>。本研究では、粉末 X 線回折 (PXRD) 測定により  $\text{Fe}_2(\text{MoO}_4)_3$  の結晶構造を調べることで、 $\text{Fe}_2(\text{MoO}_4)_3$  の合成法を検討することを目的とする。

## 2. 実験内容

$\text{Fe}_2\text{O}_3$  と  $\text{MoO}_3$  を化学量論比で混合し、750 °C で 24 h、1 回目の焼成を行なった ( $\text{Fe}_2(\text{MoO}_4)_3_1$ )。固相反応であるため、未反応領域が存在することを考え、焼成後の試料を粉砕、混合し、2 回目の焼成を行なった ( $\text{Fe}_2(\text{MoO}_4)_3_2$ )。測定試料はソーダガラスキャピラリー ( $\phi 0.5$  mm) に封入した。PXRD 測定はいち SR BL5S2 ビームラインで行い、入射光には波長 1.033 Å のシンクロトロン光、検出器には二次元半導体検出器 PILATUS 100K 4 連装を用い、測定は室温で行った。

## 3. 結果および考察

PXRD 測定の結果を Figure 1 に示す。1 回焼成した  $\text{Fe}_2(\text{MoO}_4)_3_1$  において、 $\text{Fe}_2(\text{MoO}_4)_3$  のシミュレーションパターンと一致する回折線が観測され、原料の残存は見られなかった。2 回焼成した  $\text{Fe}_2(\text{MoO}_4)_3_2$  の測定結果も同様であることから、1 回の焼成で十分に反応が進行したことがわかる。今後は、 $\text{Fe}_2(\text{MoO}_4)_3$  の電気化学測定を行い、電極としての特性を評価する。

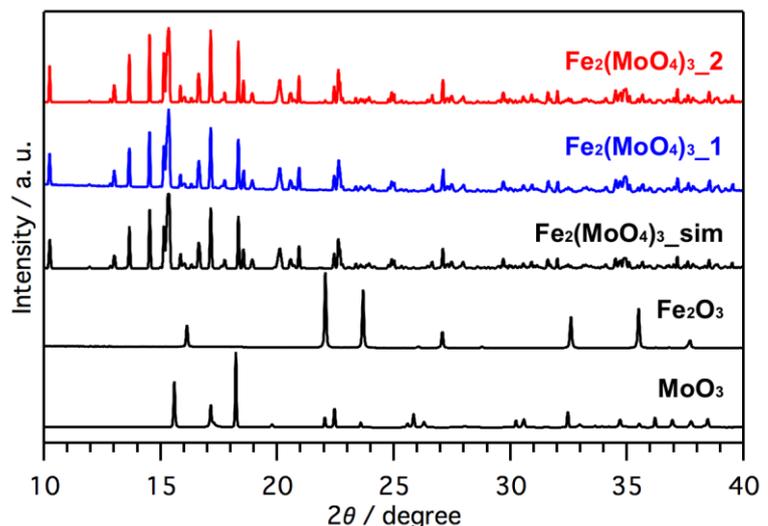


Figure 1. Synchrotron PXRD patterns of synthesized  $\text{Fe}_2(\text{MoO}_4)_3$  with synchrotron radiation of  $\lambda = 1.033$  Å.

## 4. 参考文献

1. S. Cotte *et al.*, “Iron molybdate thin films prepared by sputtering and their electrochemical behavior in Li batteries”, *Journal of Alloys and Compounds*, **735**, 1454–1462 (2018).