



次世代蓄電池用酸化物材料の結晶構造解析

藪内 直明
横浜国立大学

キーワード：リチウムイオン電池，層状材料，相変化

1. 背景と研究目的

次世代のリチウムイオン電池用正極材料としてコバルトフリー構成を実現するニッケル系材料が必要である。しかし、コバルトフリーの層状材料である LiNiO_2 を充電すると、リチウムを脱離させた際にニッケルイオンが面共有した四配位サイトに移動するために、可逆容量が低下するという本質的な問題が知られている^[1,2]。本研究課題ではアンチサイト欠陥が少ない化学両論組成の LiNiO_2 を合成し、相変化が電気化学特性に与える影響について詳細に検討を行った。

2. 結果および考察

化学量論組成の LiNiO_2 の X 線回折図形を Fig. 1 に示す。得られた試料を Rietveld 解析を行ったところ、組成はアンチサイト欠陥が存在しないことが確認された。同試料を用いて 4.15 V のカットオフ電圧でサイクルを行うと非常に優れたサイクル特性を示すことが知られていた。4.15 V 充電状態の試料を解析したところ、101 回折線の強度が高くなっており、Ni イオンが移動することを示す結果である。この結果は Ni の移動が必ずしも電気化学特性に影響することはないことを示す結果である。しかし、4.4 V まで充電すると、さらに Ni イオンの移動が進むことが確認され、過剰な Ni イオンの移動が電気化学特性に影響することが確認された。これらの結果は、化学両論組成の LiNiO_2 の電気化学特性に影響する因子解明に繋がる結果である。

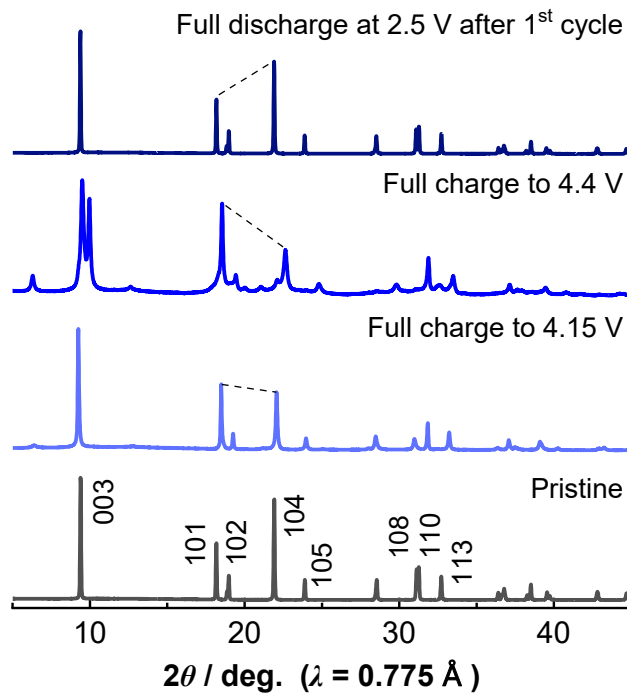


Fig. 1 化学量論組成の $\text{Li}_{1-x}\text{NiO}_2$ の放射光 X 線回折図形

4. 参考文献

1. N. Ikeda *et al.*, and N. Yabuuchi, *Journal of Materials Chemistry A*, **9**, 15963-15967 (2021).
2. I. Konuma *et al.*, N. Yabuuchi, *Energy Storage Materials*, **66**, 103200 (2024).