

# トピックス

## コインセルサイズでリチウムイオン電池用正極材料の充放電過程の中性子回折測定に成功

東京理科大学の井手本 康教授らの研究グループは、これまで困難とされていた、コインセルサイズにおける正極を用いて正極活物質の充放電過程の結晶構造解析を行ない、世界で初めて中性子回折により充放電過程の結晶構造の変化を捉えることに成功した。今回の研究成果は、今までは原因がわからずリチウムイオン電池の長寿命化の妨げとなっていた、電極特性の充放電過程の劣化要因の解明に高い期待が持てることを示唆している。

リチウムイオン電池は、繰り返し充放電が可能な二次電池の一つで、携帯、PC、自動車の電源として広く使用され、注目されている。このリチウムイオン電池の更なる高性能化を実現するためには、結晶構造の観点からの材料設計を行うことが必要不可欠である。特に、リチウ

ムイオン等の軽元素が電荷担体であること、酸素量により電池特性が影響を受けることから、中性子線を用いての結晶構造解析に高い期待が寄せられていた。このような背景から、本研究では、コインセルサイズのリチウムイオン電池用正極について J-PARC の「iMATERIA」による中性子回折測定を行なった。

リチウムイオン電池用正極材料としては、層状岩塩型構造を持つ  $\text{LiMO}_2$  系材料 (M: 遷移金属) に着目し、従来の中性子回折法では困難であった電気化学的な充放電プロセスにおける構造変化の検討を試みた。充電後の電池の正極合材に含まれる約 8mg の正極活物質についてリートベルト法を用いて結晶構造を解析した結果、リチウム組成、カチオンミキシング、 $\text{MO}_6$  八面体の歪み、Bond Valence Sum の変化を捉えることに成功した。このように、コインタイプセルの正極自体で解析を行なえた成果は世界でも初めてである。通常、中性子回折には多くの試料 (1g 以上) を要するため、コインタイ

プセルのような小型セル用の電極を用いて解析を行うのは非常に困難であり、本成果は非常に有意義な結果である。

今回、直径 1cm のコインセルサイズセルで正極合材を含む正極自体を用いて正極活物質の中性子回折の測定に成功したことで、少量 (8mg) でも充電過程のリチウム組成は構造解析で決められており (分析組成に一致)、遷移金属層の遷移金属と置換したリチウムは、充放電中に係わらないことがわかった。つまり、これまで不明だった充放電過程に電極特性のさまざまな劣化の要因が in situ で解明される可能性が示唆され、リチウムイオン電池の高性能化を目指す研究展開が期待される。

(東京理科大学理工学部 教授 井手本 康  
連絡先: 〒278-8510 野田市山崎 2641)

URL: <http://www.rs.noda.tus.ac.jp/idemotol/index.html>

[2011 年 2 月 3 日原稿受付]