

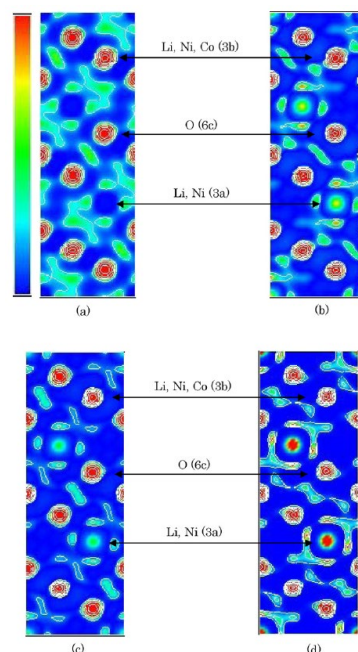
# 中性子・放射光 X 線を相補利用した Li イオン電池用正極材料の 充放電過程における平均・局所構造変化の解明

東京理科大学理工  
井手本 康

*Faculty of Science and Technology, Tokyo Univ. of Science*  
Y. Idemoto

リチウムイオン電池正極材料の充放電過程では、リチウムの脱挿入過程の構造変化が特性を支配する重要なキーになる。平均構造解析においては、コインセルサイズの正極で中性子回折を用いて充放電過程の構造変化を捉えることに J-PARC の BL20 を用いて世界で初めて成功した。さらに、正極材料において中性子全散乱測定を行い、結晶 PDF 解析を先駆けて適用することで局所構造解析も可能になり、平均構造では明らかにできなかった局所的な構造変化（歪み、秩序-無秩序配列）などについて中性子、放射光 X 線を相補的に用いて明らかにした。ここで局所構造初期モデルなどの妥当性の検証もこの理論計算で行うことができる。これらの方法を組み合わせて多角的に取り組むことで電池特性を支配する因子を明らかにし、電極材料の開発指針を得ていくことを目指している。

本報告では、リチウムイオン電池正極材料  $0.5\text{Li}_2\text{MnO}_3$ - $0.5\text{Li}(\text{Mn}_{1/3}\text{Ni}_{1/3}\text{Co}_{1/3})\text{O}_2$  系固溶体の充放電レートが平均・局所構造に与える影響などについて触れる。一方、JRR-3 の HERMES を用いた研究では、リチウムイオン電池用正極材料、イオン伝導体などの Pristine の試料における平均構造解析においては、試料量、測定時間に依るところはあるが、電池用正極材料、イオン伝導体など高機能性酸化物の軽元素、酸素、原子番号が近い 3d 遷移金属の結晶構造パラメータを精密に決定して、Bond Valence Sum, 多面体の歪、原子核密度分布(図)などと特性の関係を検討することも可能である。また、本報告で述べる放射光 X 線との相補利用も可能である。中性子の測定、解析の入門、汎用設備として、中性子に触れて、その有用性を理解してもらう役割としても重要と考えられる。



1) Y.Idemoto, et al., *J. Power Sources*, **189**, 269-278(2009).

図 :  $\text{Li}_x\text{Ni}_{0.8}\text{Co}_{0.2}\text{O}_2$  (1 1 0) plane  
における原子核密度分布の Li  
組成依存<sup>1)</sup>