

1. Introduction

カーボンニュートラルの実現に向け、二次電池の高エネルギー密度化や長寿命化は重要なテーマである。現行の液系電解質を用いたリチウムイオン二次電池は多くのアプリケーションで使用されている一方、安全性の課題が指摘されている。固体電解質は液系電解質に比べてイオン伝導性が低いという課題があるものの、安全性、耐久性、大容量化の点で優位性を秘めており、各社で高イオン伝導性を持つ固体電解質の開発が進められている。

受託分析試験サービスを提供する当社では、汎用的なX線回折装置による結晶構造解析に加え、Liなどの軽元素解析に適した中性子回折まで計測・解析領域を拡大し、固体電解質など、二次電池の研究開発に貢献することを目指している。

2. Experiment

固体電解質の高イオン伝導化を実現するには、結晶構造の最適化が課題のひとつと考えており、Liなど軽元素を含めた中性子結晶構造解析は高イオン伝導材料開発において有効なツールとなる。

そこで今回は、正極活物質や固体電解質等の様々な種類の電池材料を対象とし、中性子回折計測および解析を実施し、中性子回折の有効性評価を行った。

3. Results

図1に(a)LiCoO₂, (b)LiNiO₂, (c)LPSCのリートベルト解析結果を示す。各試料とも良好なフィッティング結果が得られており、特にLPSCにおいては特定サイトの占有率や元素置換が、パラメーターが発散することなく解析可能であった。

4. Conclusion

本結果から中性子回折の有効性を確認することができた。ラボX線回折装置に加え、中性子回折による解析評価を取入れた結晶構造解析の受託サービスラインナップで、二次電池の研究開発に貢献していく。今後は in-situ および operando 計測・解析にも取り組んでいく計画である。

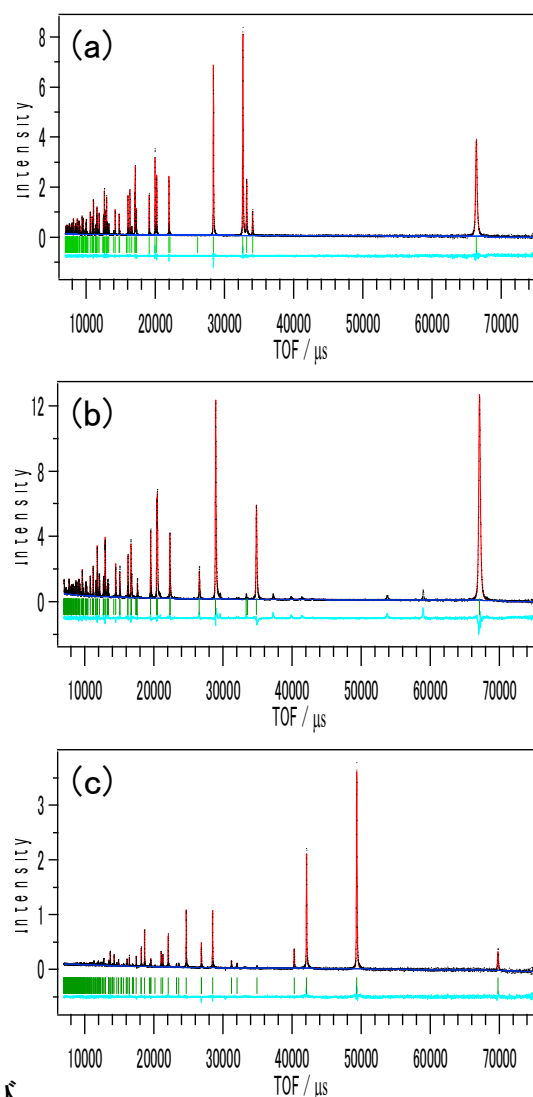


図1 リートベルト解析結果