

Li_{1.3}Nb_{0.3}M_{0.4}O₂ (M: 3d 遷移金属)系正極材料の 原子配列解析とトポロジー解析

Atomic configuration analysis and topological analysis

of Li_{1.3}Nb_{0.3}M_{0.4}O₂ (M: 3d transition metal)-based positive electrode materials

東理大創域理工¹ ○林 柚那・北村 尚斗・石橋 千晶・井手本 康

Tokyo Univ. of Sci.¹, ○Yuna Hayashi¹, Naoto Kitamura¹, Chiaki Ishibashi¹, Yasushi Idemoto¹

E-mail: 7223560@ed.tus.ac.jp

1. 緒言 不規則岩塩型構造の Li_{1.3}Nb_{0.3}M_{0.4}O₂ (M: 3d 遷移金属)はリチウムイオン電池の正極材料として精力的に研究されている¹⁾。また、この材料には局所的なカチオン配置 (クラスター構造) が存在していることが知られているが²⁾、その原子配列には依然不明な点が多い。そこで本研究では Li_{1.3}Nb_{0.3}M_{0.4}O₂ (M=Fe など) に注目し、その正極特性を調べるとともに、全散乱データを解析することにより原子配列を検討した。また、得られた原子配列についてパーシステントホモロジーに基づくトポロジー解析を行い、クラスター構造を検討した。

2. 方法 Li_{1.3}Nb_{0.3}M_{0.4}O₂ を固相反応法にて合成した。粉末 X 線回折により相の同定を行い、ICP-AES により金属成分の組成分析を行った。また、60°Cにて充放電作動試験を行った。このとき、正極特性の向上を目的として、ボールミル処理により微粒子化した試料とボールミル処理後に熱処理した試料を作製した。これらの試料について、放射光 X 線全散乱測定 (BL04B2, SPring-8) を行い、構造因子 $S(Q)$ と簡約二体分布関数 $G(r)$ を試料ごとに比較した。さらに、全散乱データの解析により得られた原子配列を用いてトポロジー解析を行った。

3. 結果と考察 XRD の結果より、合成した試料は立方晶の不規則岩塩型構造を有することがわかった。また、ボールミル処理後は Bragg ピークの半値幅が増加し、非晶質化が進んでいることが示唆

された。得られた試料について充放電測定を行った結果、ボールミル処理した試料において、放電容量の顕著な減少が見られたが、ボールミル処理後にさらに熱処理することで、放電容量が増加する傾向が見られた。原子配列と正極特性の関係を明らかにするため、逆モンテカルロモデリングにより、X 線全散乱データを再現できる構造モデルを得た。得られた原子配列からカチオンの分布を検討したところ、ボールミル前の試料では局所的な

電荷補償の維持から、Li と Nb が配位しやすい傾向にあった。また、トポロジー解析により、局所的に特異な Nb 配列が存在していることが示唆された。

参考文献 1) N. Yabuuchi et al., *Nat. Commun.*, **7**, 13814 (2016).

2) N. Kitamura et al., *Phys. Status Solidi B*, **257**, 2000112 (2020).

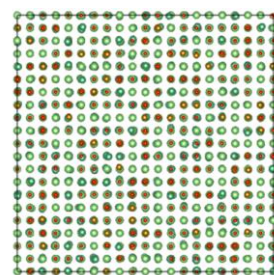


Fig. 1 Atomic configuration of pristine Li_{1.3}Nb_{0.3}Fe_{0.4}O₂ obtained by analyzing X-ray total scattering data.