

「X線発光・吸収分光法を用いたリチウムイオン電池電極材料の電子状態解析」

株式会社 豊田中央研究所 西村 友作

1. 概要

リチウムイオン電池の高性能化には、電極構成元素、特に充放電に寄与する活性サイトの実作動条件での詳細状態理解が必要である。本研究では透過能の高い硬 X 線を用いる X 線発光分光法 (XES)・X 線吸収分光法(XAS)に着目し、Al ラミネートセル内に密閉された電極の充放電に寄与する軌道状態を観測可能か検証した。X 線ラマン散乱分光法(XRS)で黒鉛内の C 2p 軌道状態を、共鳴 X 線発光分光法で層状 Ni 系酸化物内の Ni 3d 軌道状態をそれぞれ評価できることがわかった。

2. 講演内容

- ・ リチウムイオン電池電極材料開発のための *operando* 電子・酸化状態評価の概要
- ・ 内容① 局所構造情報に基づく電荷補償元素の酸化状態評価
- ・ 内容② 共鳴 XES, 高エネルギー分解蛍光 XAS, XRS による充放電反応に寄与する電子軌道の状態評価

3. 講演内容に関する文献

- [1] Yusaku F. Nishimura, Yasuhito Kondo, and Hideaki Oka, “Estimation of the average oxidation number of nickel in a nickel oxide based on local structural information”, *Journal of Power Sources*, **446**, 227351 (2020). DOI: 10.1016/j.jpowsour.2019.227351
- [2] Yusaku F. Nishimura Hideaki Oka, Takamasa Nonaka, Yoshinari Makimura, and Kazuhiko Dohmae, “Hard X-ray spectroscopic methods using emitted X-ray to understand charge compensation in positive electrode materials for lithium-ion batteries”, *Journal of Power Sources*, **434**, 226721 (2019). DOI: 10.1016/j.jpowsour.2019.226721
- [3] Takamasa Nonaka, Hiroyuki Kawaura, Yoshinari Makimura, Yusaku F. Nishimura, and Kazuhiko Dohmae, “In situ X-ray Raman scattering spectroscopy of a graphite electrode for lithium-ion batteries”, *Journal of Power Sources*, **419**, 203–207 (2019). DOI: 10.1016/j.jpowsour.2019.02.064
- [4] Takamasa Nonaka and Yusaku F. Nishimura, “Hard X-ray Photon-in/Photon-out Spectroscopies of Lithium-ion Battery Electrodes”, *Synchrotron Radiation News*, **33**, 34–39 (2020). DOI: 10.1080/08940886.2020.1812356

4. 謝辞

本講演に関わる放射光利用実験は、SPring-8 研究課題(課題番号 2014B1574 [BL39XU]; 2014B1582 [BL27SU]; 2006A5372 [BL16B2]; 2014A7008, 2015A7008, 2016A7008, 2016B7008, 2017A7008, 2017B7008 [BL33XU])として実施しました。研究遂行にあたりご支援賜りました公益財団法人高輝度光科学研究センター(JASRI) 河村直巳博士, 水牧仁一朗博士, 室隆桂之博士, 日本女子大学 林久史教授, 株式会社豊田中央研究所 野中敬正博士, 岡秀亮氏, 牧村嘉也博士, 川浦宏之博士, 堂前和彦氏(現 JASRI)に心から厚く御礼申し上げます。