KOBELCO
神戸製鋼グループ

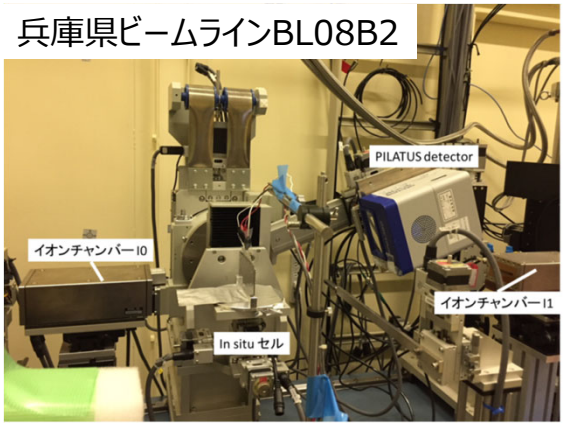
＜放射光を用いたリチウムイオン電池のその場分析②硬X線＞

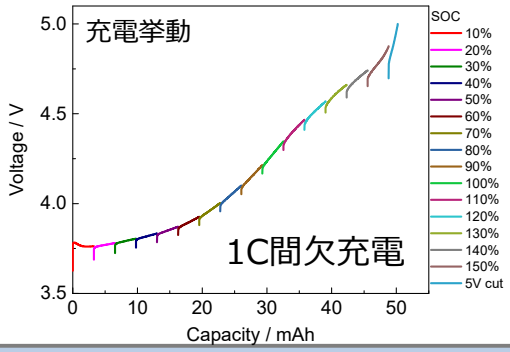
高輝度X線を利用することで、リチウムイオン電池用電極材料の充放電反応を二次電池動作環境下・電解液中で分析可能です。透過能の低い軟X線においてもその環境を構築可能です。

“その場”XAFS/XRD同時計測による反応分析～$LiNi_{1/3}Co_{1/3}Mn_{1/3}O_2$の例～

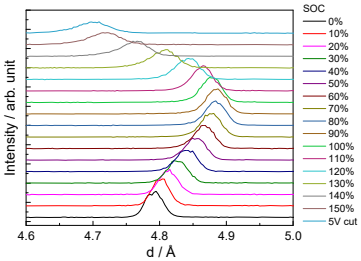
充放電測定しながらのXAFS, XRD同時計測により、充放電特性と結晶構造・電子構造・局所構造情報をすべて同時に取得可能です。

兵庫県ビームラインBL08B2



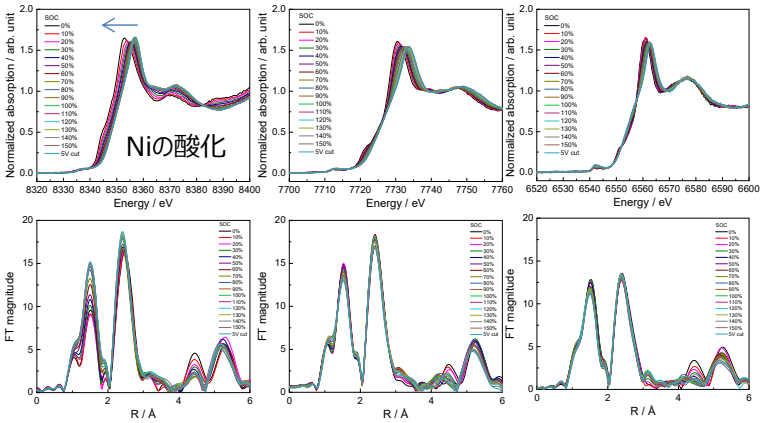


XRD($LiNi_{1/3}Co_{1/3}Mn_{1/3}O_2$の003面)



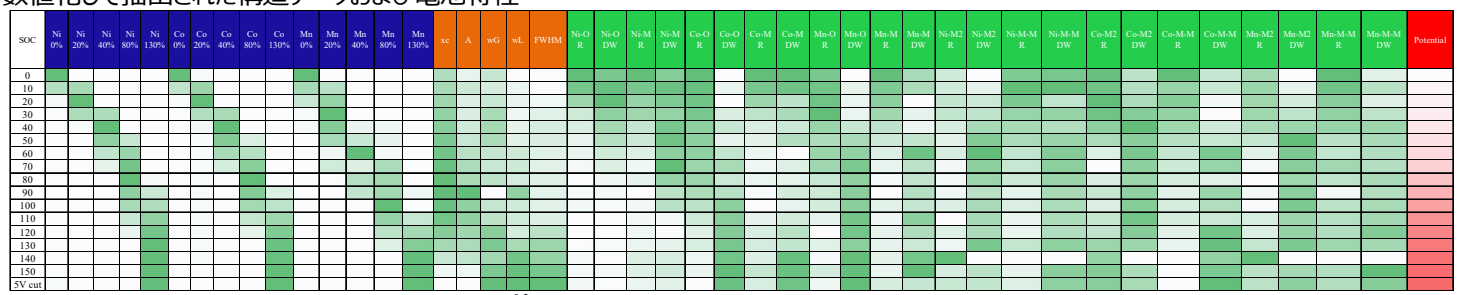
単相ラミネートセルで測定可能
(実験セルは対極Liのハーフセル)
XRD(XAFS測定毎に測定)
測定時間：10sec.
角度範囲：中心角度±10°
XAFS(Ni, Co, Mn K-edge)
測定時間：1min.(Ni-Coは同時に測定)
フーリエ変換範囲：k = 2.0 – 11.5 $Å^{-1}$

Ni-K XAFS　Co-K XAFS　Mn-K XAFS



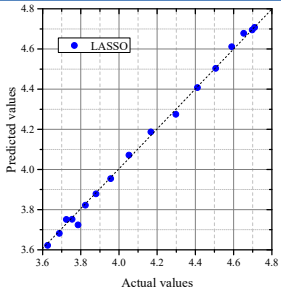
“その場”データを利用したインフォマティクス解析～$LiNi_{1/3}Co_{1/3}Mn_{1/3}O_2$の例～

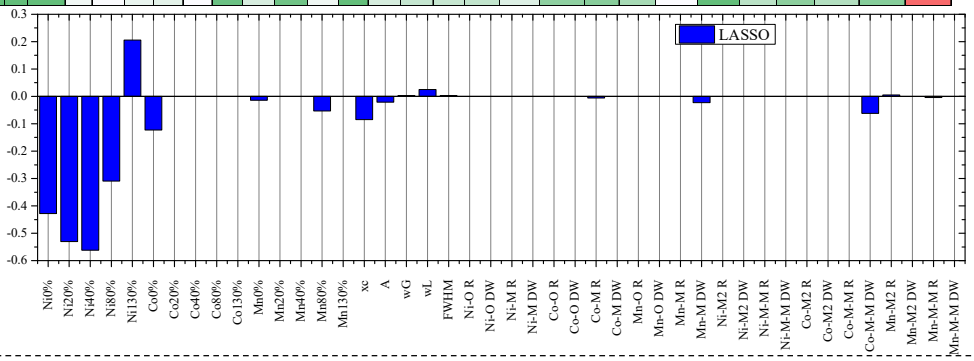
数値化して抽出された構造データおよび電池特性



1:1交差検証による各種手法の決定係数R^2

LASSO	Elastic Net
0.993	0.970
Random Forest	Extra Trees
0.895	0.934





Ni K-edge XANESに関するパラメータ(Niの電子構造を反映)が選択、Niの電子構造変化が$LiNi_{1/3}Co_{1/3}Mn_{1/3}O_2$正極材料の電位を決める因子であると推定された。⇒基礎知識なしでデータ駆動的に解析できた。

SR測定は兵庫県×Mi²i(情報統合型物質・材料開発イニシアティブ)協力