

放射光を活用した車載用リチウムイオン電池材料分析技術の取り組み*

Synchrotron Analysis for Automotive Lithium-Ion Battery

百崎 賢二郎¹⁾
Kenjiro Momosaki

三根生 晋¹⁾
Susumu Mineoi

山本 知樹¹⁾
Tomoki Yamamoto

住田 弘祐¹⁾
Hirosuke Sumida

Lithium-ion batteries for electric vehicles face the challenge of achieving both high energy density and improved safety and durability. In this study, synchrotron-based analyses were conducted to investigate local degradation behavior within active materials and at electrode/electrolyte interfaces. This approach enables evaluation of the relationship between the fraction of high-valence Ni species in cathodes and degradation progression.

KEY
WORDS
OF

Materials, Secondary Battery Material
Synchrotron, HAXPES, XAFS, Bayesian Inference [D3]

1 はじめに

マツダはカーボンニュートラル実現に向けてCO₂排出量削減と走る欲びを高次元で両立する自動車の開発を進めている。多様な動力源を適材適所で展開するマルチソリューション戦略の中で、本取り組みは高容量・高入出力リチウムイオン電池を要とした電動化技術に貢献する。電気駆動自動車の燃費、電力消費率を向上させるためには、車両に搭載されるリチウムイオン電池を高エネルギー密度化することが有効であるが、そのためには電極の高容量化および安全性・耐久性との両立が課題である。Ni, Co, Mnなどの層状遷移金属酸化物系の活物質ではNi比率を高めて単位重量当たりの容量を増やすことが有効であるが、一方で充電時のLi引き抜きにより結晶構造が不安定となり、電池寿命（繰り返し充放電性能）が低下する。高エネルギー密度化と安全性・耐久性を両立させるためには正極、電解液とその界面における局所的な化学状態の変化を高精度に分析し、劣化メカニズムを明らかにすることが重要である。そのためには材料機能を原子、分子レベルから制御する必要があり、従来の実験室レベルの分光分析装置に加えて空間、時間分解能の面でより高精度な放射光

を用いた技術開発が重要となる。マツダではこの原子分子レベルの挙動により発現する材料機能を、製品に至る各スケールで要求される数値モデルと関連づける材料モデルベースリサーチ（MBR：Model Based Research）を進めている。MBRを基に製品仕様から材料仕様をバックキャストすることで効率的な材料開発プロセスを構築している。

本報告では正極および電解液の界面を対象に放射光分析を実施し、材料MBRに求められるデータ解析までを行った事例および得られた知見について報告する。

2 リチウムイオン電池の構成と正極材について

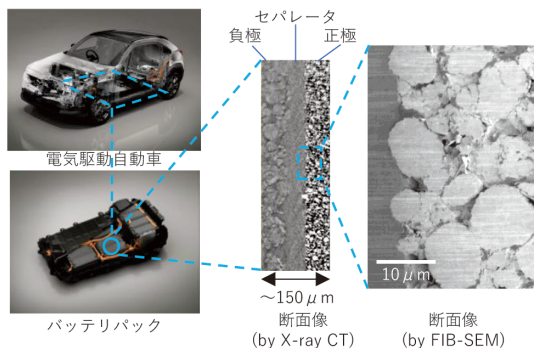


図1 電気自動車用バッテリー材料の概要

3 放射光を用いたリチウムイオン電池材料の分析

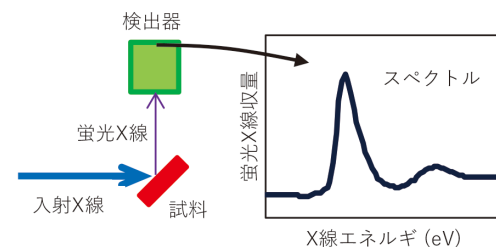


図2 XAFS測定の概略図（蛍光収率法）

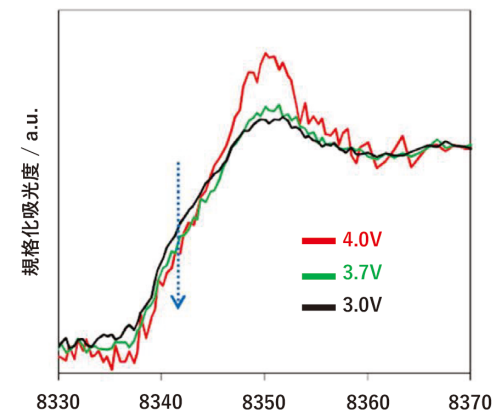


図4 異なるセル電圧下でのその場XAFSスペクトル

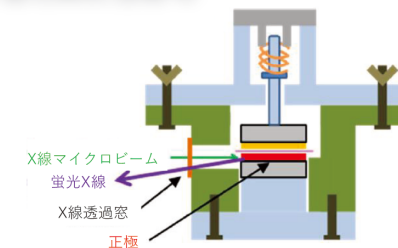


図3 その場XAFS用バッテリーセルの概要

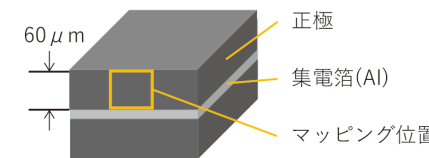


図5 その場XAFS測定のマッピング位置

表1 In-situ XAFSセルの主な構成	
正極	LiMO ₂ (M = Ni-Co-Al系)
負極	Li
セパレータ	PP
電解液	LiPF ₆ /EC/EMC/DMC