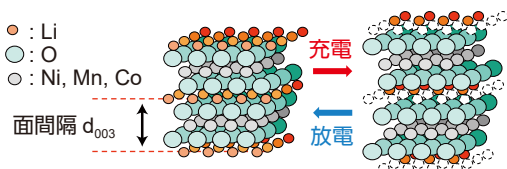


リチウムイオン二次電池 充放電状態の活物質結晶構造解析 —X線回折(XRD)—

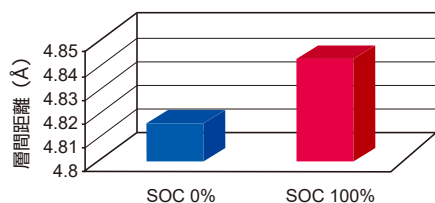
XRD では正極や負極活物質の結晶構造（格子定数、結晶子サイズ）・配向などの平均情報を得ることができる。粉末、シートいずれも評価でき、大気非暴露セルを用いれば充電状態の違いや劣化試験前後で、構造変化を比較することも可能である。ここでは、正極及び負極活物質材料に適用した事例を紹介する。

▶ 正極活物質の構造解析(三元系活物質NMC 大気非暴露 Ex-situ測定)

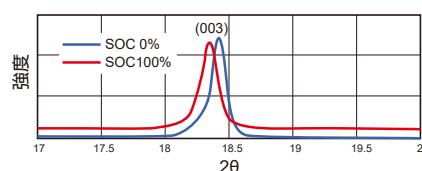
正極の構造変化



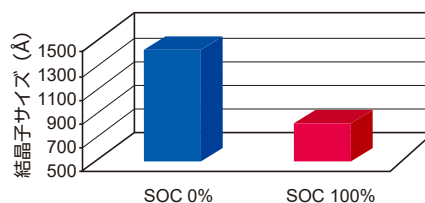
面間隔 d_{003}



XRD プロファイル

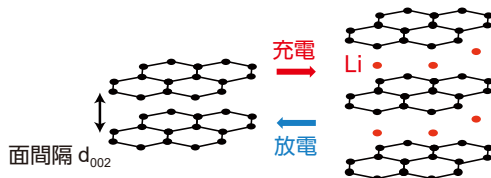


結晶子サイズ L_c

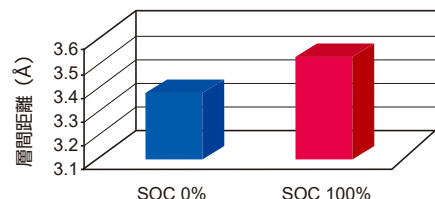


▶ 負極活物質の構造解析(天然黒鉛 大気非暴露 Ex-situ測定)

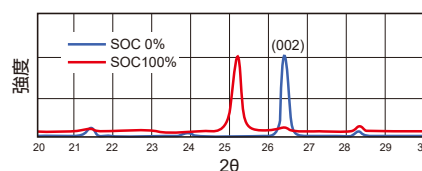
負極の構造変化



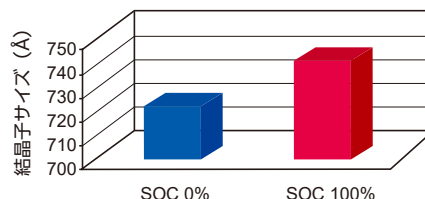
面間隔 d_{002}



XRD プロファイル



結晶子サイズ L_c



充電により正極では Li の離脱で層間の結束が弱まり、面間隔が広がった。一方、負極では Li の挿入で面間隔が広がった。正極充電時では Li の離脱の影響で結晶子サイズの低下が顕著であった。

