



酸化物系バルク型全固体電池への応用を目指した 新規リチウムイオン伝導材料の結晶構造解析

山本 貴之¹, 浦部 晃太¹, Sugumar Manoj Krishna¹, 芝 日向²
 1 名古屋大学大学院工学研究科, 2 名古屋大学工学部

キーワード：全固体リチウム二次電池, 固体電解質

1. 背景と研究目的

近い将来に訪れる電気自動車の本格普及に向けて、高エネルギー密度、高安全、長寿命を有する次世代電池の研究開発が盛んに進められている。その中の候補の一つに酸化物系全固体リチウム電池があり、固体電解質として酸化物材料を用いることで極めて高い安定性を有することが利点としてあげられる。しかし酸化物材料は一般に硬くて脆いため、固体電解質と電極活物質の界面における接触性が低く、出力特性が低下する要因となっている。その解決策の一つとして、柔らかい酸化物固体電解質を開発することが検討されており、近年では逆ペロブスカイト型構造を有する Li_3OX ($\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}$) が比較的低い融点を有する柔らかい酸化物であることが報告されている^[1]。そこで本研究では、 Li_3OBr の結晶構造と相転移挙動について調べることを目的とした。

2. 実験内容

Li_2O 粉末と LiBr 粉末を混合し、Ar 雰囲気下、500 °C で 24 h 加熱することで Li_3OBr を合成した。得られた試料を乳鉢ですりつぶし、アルゴンガスで満たされたグローブボックス中でソーダガラスキャピラリー ($\phi 0.5 \text{ mm}$) に封入した。粉末 X 線回折 (PXRD) 測定はあいち SR BL5S2 ビームラインで行い、入射光には波長 1.03 Å のシンクロトロン光、検出器には二次元半導体検出器 PILATUS 100K 4 連装を用いた。測定時には窒素ガス吹き付けにより温度制御を行い、室温から 290 °C の温度範囲で測定を行った。

3. 結果および考察

Fig. 1 に Li_3OBr の PXRD 測定結果を示す。室温の PXRD パターンから、不純物の少ない Li_3OBr の合成に成功したことがわかる。290 °C では Li_3OBr の結晶性のピークは消失しており、 Li_3OBr が 300 °C 以下の融点を持つことが示唆された。また、290 °C で Li_2O 由来の小さなピークが観測されたことから、合成した Li_3OBr には未反応の Li_2O が不純物として混ざっていることがわかった。

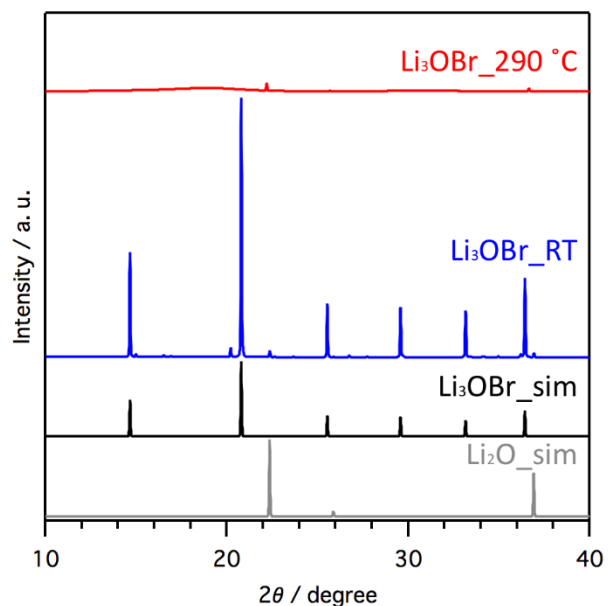


Fig.1 PXRD patterns of Li_3OBr . Blue and red patterns denote experimental data for Li_3OBr measured at RT and 290 °C, respectively. Black and gray patterns denote simulated patterns for Li_3OBr and Li_2O , respectively.

4. 参考文献

1. Y. Zhao and L. L. Daeman, "Superionic Conductivity in Lithium-Rich Anti-Perovskites", *Journal of the American Chemical Society*, **134**, 15042–15047 (2012).