

## 【技術資料】 Li イオン電池材料の XRD による解析(最大エントロピー法)

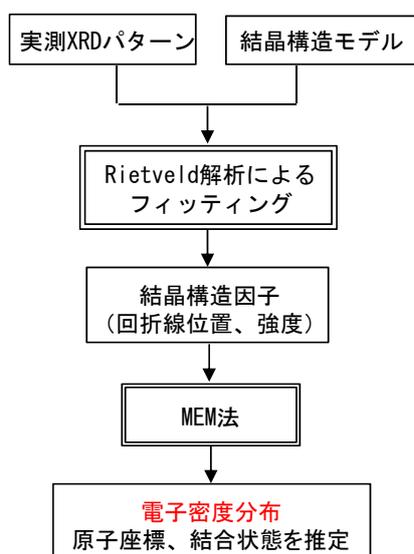
### 概要

Li イオン電池の正極材には  $\text{LiCoO}_2$  や  $\text{LiMn}_2\text{O}_4$  などのリチウム含有遷移金属酸化物が使用されており、材料開発には Li 状態の解析が重要です。Li は軽元素のため X 線散乱能が低く、X 線を用いた構造解析(Rietveld 解析)が困難ですが、最大エントロピー法(MEM 法)を用いた電子密度分布解析より Li 状態を推定可能です。

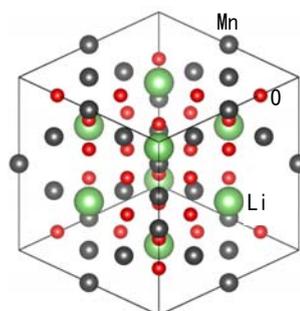
### 分析事例の紹介

MEM 法により  $\text{LiMn}_2\text{O}_4$  の電子密度分布を推定し、Li 状態を解析しました。

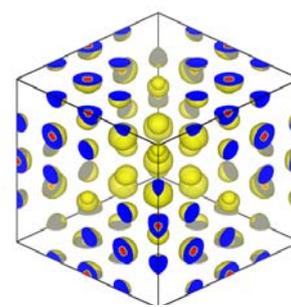
使用ソフトウェア: RietanFP<sup>1)</sup>、Dysnomia<sup>2)</sup>



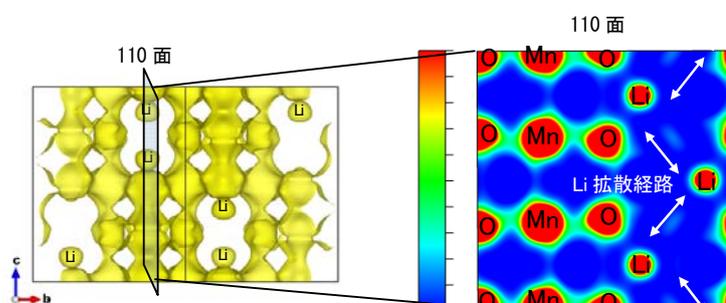
【図1】MEM法の原理



【図2】 $\text{LiMn}_2\text{O}_4$ の結晶構造



【図3】 $\text{LiMn}_2\text{O}_4$ の電子密度分布



【図4】110面に沿った断面の電子密度分布

このように、電子密度分布から Li の存在位置を精密に評価可能です。また、断面の電子密度分布から、110面に沿ったトンネル構造の内部を Li 拡散経路と推察しました。

適用分野：電池、ゼオライト、セラミックス、その他結晶性材料

材料キーワード：Li イオン電池、正極材、最大エントロピー法(MEM 法)、XRD、結晶構造解析、電子密度

### 参考文献

- 1) F. Izumi and K. Momma, *Solid State Phenom.*, 130, 15–20 (2007)
- 2) K. Momma, T. Ikeda, A. A. Belik and F. Izumi, *Powder Diffr.*, 28, 184–193 (2013)