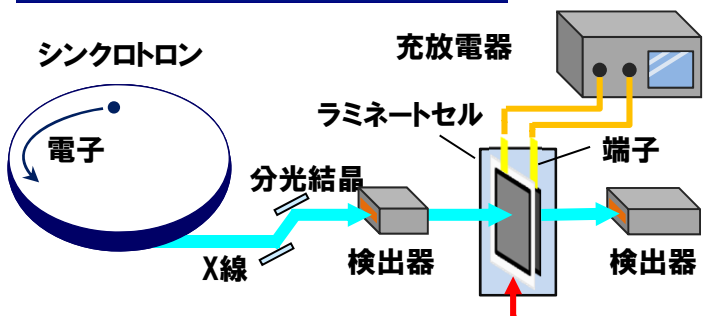


# 充放電 *in situ* XAFSによる正極活物質の状態分析

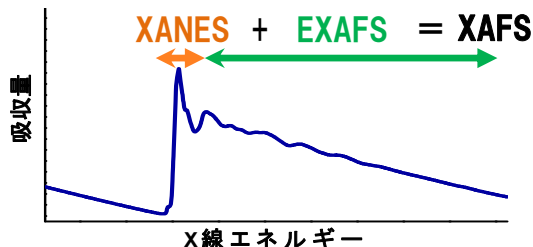
試料に電位をかけてXAFS測定することにより、注目する元素の価数や配位環境の電位による変化を追うことができる。今回はラミネートセルを用いて正極活物質中の遷移金属を評価した例を紹介する。

## 充放電 *in situ* XAFS (測定原理)



ラミネートセル以外に正極シートでも測定可能  
(正極シートでは軟X線XAFSによる表面分析も可能)

## XAFSスペクトル



## 正極活物質のXAFS分析から得られる知見

**XANES:** 価数 (Ni: Ni<sup>2+</sup>, Ni<sup>3+</sup>, Ni<sup>4+</sup>など)  
**EXAFS:** 元素周囲の構造 (結合距離など)  
遷移金属ごとの知見が得られる

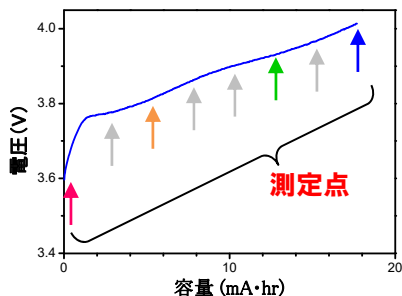
## 充放電 *in situ* XAFSの評価例

正極活物質中の遷移金属について  
充放電時の価数、構造変化を評価

### 試料

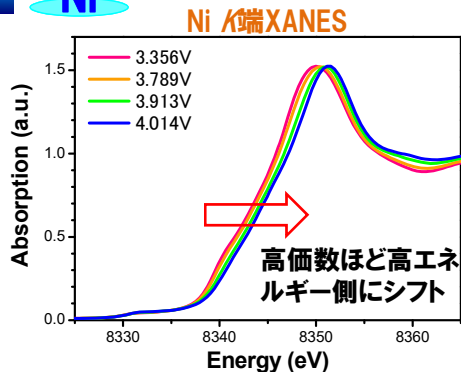
セル: 積層型ラミネートセル  
正極: Li(NiMnCo)O<sub>2</sub>  
(Ni:Mn:Co=5:3:2)  
負極: グラファイト  
電解液: EC/DEC(1/1)  
+ 1M LiPF<sub>6</sub>

### ラミネートセルの充電曲線

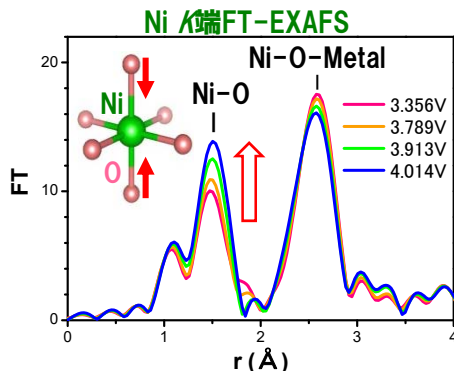


- ・充電しながら連続でXAFS測定
- ・測定は各元素ごとに実施 (NiとCoは同時に測定)

### Ni

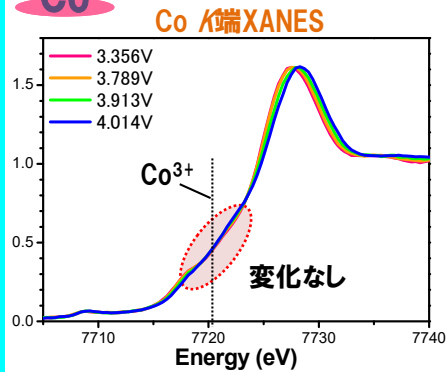


充電によってNi<sup>3+</sup> → Ni<sup>4+</sup>

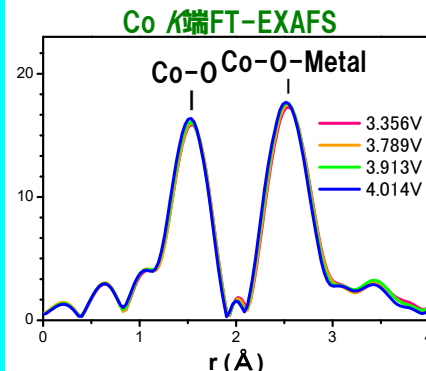


一部のNi-O結合距離が変化  
(この変化はNi価数変化に依存)

### Co



顕著な価数変化はなし



顕著な構造変化はなし

(Mnは価数、構造ともにCoと類似の傾向)

充放電 *in situ* XAFSを用いることで、正極の詳細な化学状態・構造評価が可能となる