

[rigaku.com](https://www.rigaku.com)で見る

BATT1012 - BVS法を用いた価数 とリチウムイオン拡散経路の推定

はじめに

一般的に正極材料の価数は電池性能に影響を及ぼすため、XAFS (X線吸収微細構造解析)やESCA(X線光電子分光法)等で分析されています。BVS(結合価数和)法により、XRDでも原子間距離から価数を推定することが可能です。また、BVS法の応用により、Liイオンが1価になり易い原子間距離を求めることで、拡散経路を推定できます。

構成分析

- 材料: 正極材料
- 用途: 研究開発
- 分析材料: LiFePO_4 , LFP正極
- 使用機器: [SmartLab](#)、[SmartLab SE](#)
- 解析手法: リートベルト解析、BVS法

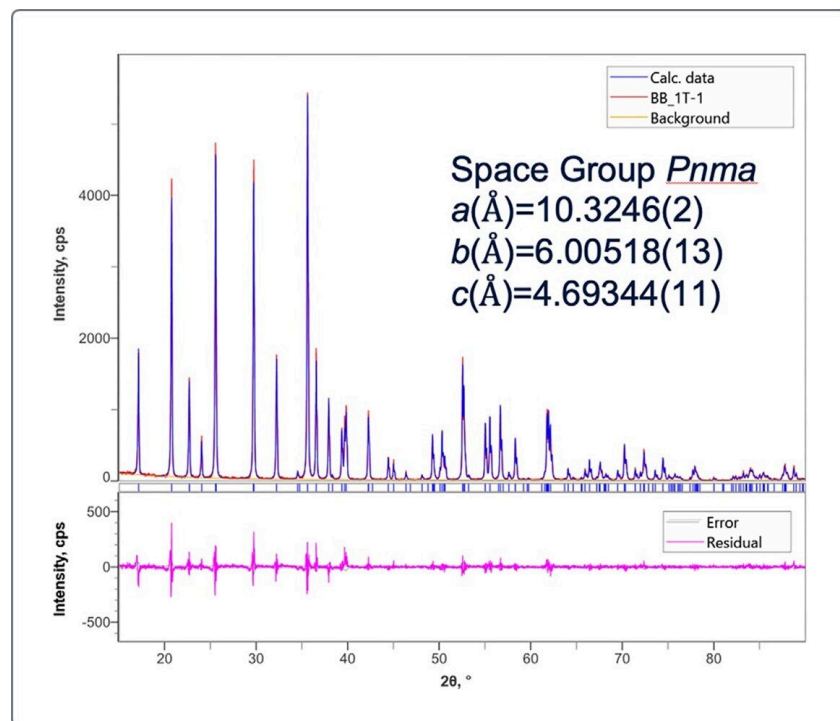


Figure 1: LFPのRietveld解析結果と得られた格子定数
(R_{WP} :11.13%, S :1.33)

原子	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	BVS法による価数
Li1	0	0	0	0.98
Fe1	0.28231(9)	0.25	0.9744(3)	1.91

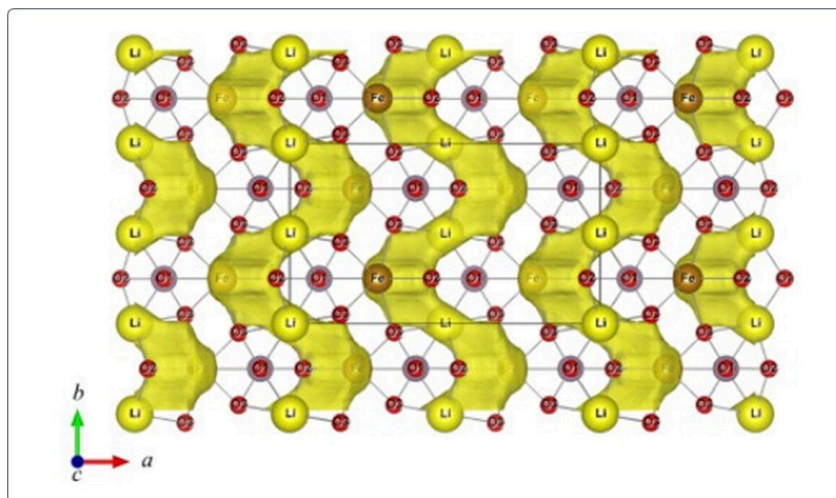


Figure 2: Rietveld解析から得られたLiとFeの座標とBVS法から得られた価数（上）とBVS法から推定されたLiイオンの拡散経路（下）

VESTAで描画, K. Momma and F. Izumi, “VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data,” J. Appl. Crystallogr., 44, 1272-1276 (2011).

結論

リートベルト解析で、詳細な結晶構造の解析が可能です。また、BVS法で、価数とLiイオン拡散経路の推定も可能です。

おすすめの製品



SmartLab SE

全自動多目的X線回折装置 *SmartLab SE*

リガクの分析ノウハウを凝縮した「ガイダンス」機能を搭載。



SmartLab

全自動多目的X線回折装置 *SmartLab*

装置が最適条件を教えてくれるガイダンス機能を実現。