

カチオンディスオーダーが促進する 逆蛍石構造と岩塩構造のトポタクティックな相変化

(東北大多元研) 小林弘明・本間格

(東大) 塚崎隆志・小笠原義之・日比野光宏・工藤徹一・水野哲孝・山口和也

ACS Appl. Mater. Interfaces Vol. 12, No. 39,

43605–43613.

Published online: 4 Sep 2020

DOI: 10.1021/acsami.0c10768

Cation-Disorder-Assisted Reversible Topotactic Phase Transition between Antifluorite and Rocksalt toward High-Capacity Lithium-Ion Batteries

Hiroaki Kobayashi, Takashi Tsukasaki, Yoshiyuki Ogasawara, Mitsuhiro Hibino, Tetsuichi Kudo, Noritaka Mizuno, Itaru Honma, Kazuya Yamaguchi

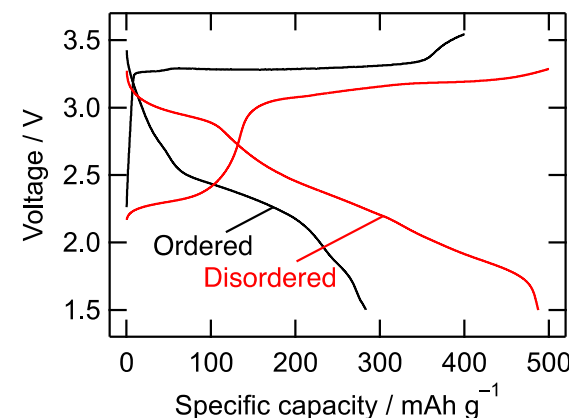
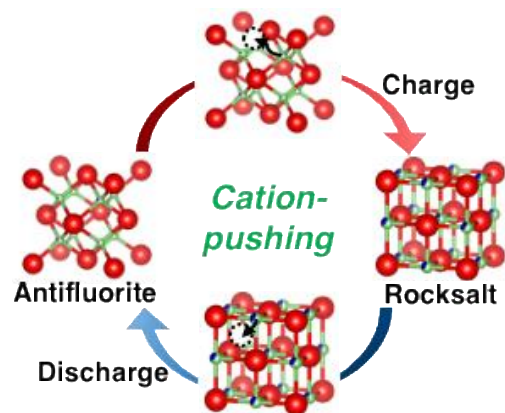


Figure1. Schematic illustration of topotactic phase transition of Li_6CoO_4 .

Figure2. Voltage curves of cation-disordered/ordered Li_6CoO_4 cathode.

逆蛍石型リチウム複酸化物は脱挿入可能なリチウム量が多く、リチウムイオン電池の高容量正極材料として注目されている。本論文ではリチウムイオンの脱挿入に伴い逆蛍石構造と岩塩構造の間で酸素骨格の変化なく相変化が起こることを明らかにした。さらに、メカニカルアロイングにより逆蛍石型 Li_6CoO_4 のカチオンサイトがディスオーダーすることで正方晶から立方晶に変化し、相変化反応が促進され、遷移金属あたり3電子反応(489 mAh g^{-1})のレドックスが進行することを見出した。

A reversible three-electron reaction is demonstrated utilizing topotactic phase transition between antifluorite and rocksalt in a cation-disordered antifluorite-type cubic Li_6CoO_4 cathode. This cubic phase is synthesized by a simple mechanochemical treatment of conventionally prepared tetragonal Li_6CoO_4 . The mechanochemical treatment is assumed to reduce its lattice distortion by cation-disordering, and facilitate a reversible topotactic phase transition between antifluorite and rocksalt structures via dynamic cation pushing mechanism.