

## 고성능 이차전지 양극재료 개발 지원

Supporting to develop the new cathode materials for  
high-performance Li-ion batteries

*KAERI*

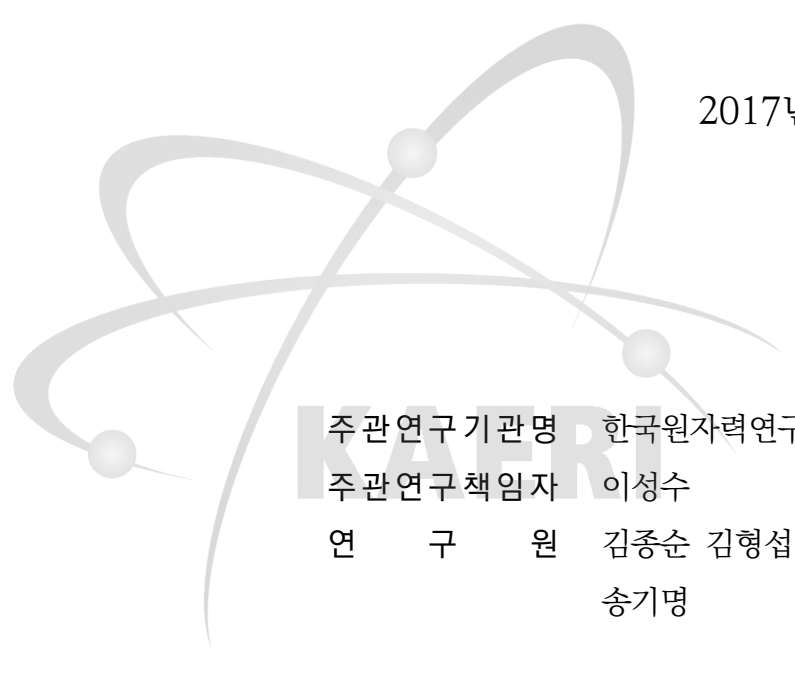


## 제 출 문

한국원자력연구원장 귀하

이 보고서를 “중소·중견기업 기술혁신개발지원사업” 과제 세부과제  
“고성능 이차전지 양극재료 개발 지원”의 연구보고서로 제출합니다.

2017년 2월 7일



주 관 연구 기관 명 한국원자력연구원  
주 관 연구 책임자 이성수  
연 구 원 김종순 김형섭  
송기명



## 보고서 요약서

과제고유번호	79641-15	해당단계 연구기간	2015.12.01 2016.11.30	단계구분	1/1		
연구사업명	중사업명	중소·중견기업 기술혁신개발지원사업					
	세부과제명						
연구과제명	대과제명	중소·중견기업 기술혁신개발지원사업					
	세부과제명	고성능 이차전지 양극재료 개발 지원					
연구책임자	이성수	해당단계 참여 연구원수	총	4명	해당단계 연구비	정부	60,000 천원
			내부	3명		기업	천원
			외부	1명		계	60,000 천원
						총	4명
		총연구기간 참여 연구원수	총	4명	총 연구비	정부	60,000 천원
			내부	3명		기업	천원
			외부	1명		계	60,000 천원
						총	4명
				기업	천원		
				계	60,000 천원		
연구기관명 및 소속부서명	한국원자력연구원 중성자과학연구부 중성자장치개발관리부			참여기업명	한국유미코아유한회사		
국제공동연구	상대국명 :			상대국 연구기관명 :			
위탁연구	연구기관명 :			연구책임자 :			
요약(연구결과를 중심으로 개조식 500자 이내로 작성합니다.)				보고서 면수	30p.		
<p>- 중성자회절을 통해 Ni-rich NCM 전극재료의 가장 큰 문제점인 Li-Ni site mixing 형성 정도를 정확히 계산하고 전극재료의 특성을 예측함.</p> <p>- 전극재료의 열안정성 평가를 통해 이차전지 완성품의 폭발 가능성을 평가하고 고온에서의 상변화에 따른 이차전지 성능 저하를 예측함.</p> <p>- 중성자회절 및 제일계산을 이용한 신규전극재료 개발방법은 재료의 이론적 및 최적 특성을 정확히 예측하여 재료의 상용화 가능성을 손쉽게 판단 가능함.</p>							
색인어 (각 5개 이상)	한글	리튬이차전지, 중성자회절, 엑스선회절, 제일계산, 열안정성					
	영어	Li ion batteries, Neutron diffraction, X-ray diffraction, First principle calculation, Thermal stability					



---

# 요 약 문

---

## I. 제 목

고성능 이차전지 양극재료 개발 지원

## II. 연구개발의 목적 및 필요성

### 1. 기술적 측면

폭발적으로 성장 중인 세계 이차전지 시장에서 이차전지 특성 향상을 위한 원천기술 미확보로 인한 차세대 이차전지 개발의 국제 경쟁력이 상실되어 가고 있으며 근본적으로 우수한 특성을 가지는 신규 재료의 개발 및 개선이 필수적인 상황임.

### 2. 경제·산업적 측면

세계 이차 전지 시장의 규모는 2010년 110억불에서 2018년 400억불로 4배가량의 큰 급격한 팽창이 예상되며 이차 전지 시장 규모의 증가분 중 특히 전기자동차와 같은 중대형 에너지 저장용 시장 확대가 큰 부분을 차지할 것으로 예상됨.

## III. 연구개발의 내용 및 범위

### 1. 연구 수행 내용

Rietveld refinement를 이용하여 이차전지 전극재료들의 정밀 조성 분석을 통해 시료의 전기화학적/열안정성 특성을 평가하고 기존에 알려지지 않았던 신규 이차전지 전극재료에 대하여 연구함.

## IV. 연구개발결과

### 1. 연구 수행 결과

중성자회절을 통해 리튬이차전지 양극재료 NCM 811 조성 내 Li-Ni site mixing 비율을

계산하고 이에 따른 구조 내 Li diffusion 가능성을 Maximum entropy method (MEM)을 통해 분석하였으며 실시간 고온 XRD 측정을 통해 열안정성을 평가하였고 기존에 알려지지 않은 4V 급 고전압/고수명 특성을 가지는 신규 양극재료  $\text{Na}_7\text{V}_3(\text{P}_2\text{O}_7)_4$ 를 최초로 보고함.

## V. 연구개발결과의 활용계획

고용량 이차전지 재료개발을 위한 대한 차세대 분석기술력 확보는 기술 확보 자체로의 효과뿐만 아니라 관련되는 미래 산업의 발전 속도를 더욱 가속화시키는 중추적인 역할을 할 것이며, 또한 본 연구 수행에 의하여 고용량 이차전지재료 개발기술을 획득함으로써 기술 경쟁력 확보와 예상되는 특허권 분쟁에서 유리한 위치를 차지하는 무형의 경제적 효과가 있을 것으로 예상됨.





---

# SUMMARY

---

## I. Project Title

Supporting to develop the new cathode materials for high-performance Li-ion batteries

## II. Objective and Importance of the Project

### 1. Technical part

Li ion battery market is explosively growing in the world. And then, the acquisition of technologies and patents for Li ion batteries is considered as one of the important issues in the world.

### 2. Economical/Industrial parts

Li ion batteries have been considered as the best candidate of energy storage system for large scale application such as electric vehicles as well as small devices such as cellular phones. It is expected that Li ion battery market size grows dramatically each year.

## III. Scope and Contents of Project

### 1. Research scope

The structural information of electrode materials for ion batteries is calculated using Rietveld refinement with neutron/X-ray diffraction. Their thermal stability is measured using in situ high temperature X-ray diffraction.

## IV. Result of Project

## 1. Research results

Using Rietveld refinement with neutron diffraction, we calculated Li-Ni site mixing in NCM 811 which is well known as one of the best cathode materials for Li ion batteries. Maximum entropy method (MEM) showed us the possibility of fast Li diffusion in NCM 811. And, we developed a novel cathode material  $\text{Na}_7\text{V}_3(\text{P}_2\text{O}_7)_4$  with high operation potential and excellent cyclability for the first time using Rietveld refinement with neutron/X-ray diffraction and first principle calculation.

## V. Proposal for Applications

Acquiring the technologies for development of novel high performance electrode materials for ion batteries enables acceleration of development speed of various industries related to ion batteries in future as well as explosive growth of ion battery industry. Using neutron/X-ray diffraction with Rietveld refinement and first principle calculation, we can develop novel high performance electrode materials for ion batteries more quickly and efficiently than the other researchers and this acquisition of technologies and patents for ion batteries can make enhancement of national competitiveness.

---

# CONTENTS

---

<b>SUMMARY</b> .....	7
<b>Chapter 1. Purpose and importance of researches</b> .....	13
Section 1. Technical part .....	15
Section 2. Economical/Industrial parts .....	16
Section 3. Social/Cultural parts .....	16
<b>Chapter 2. Research contents and results</b> .....	17
Section 1. Research contents .....	19
1. Structural analyses using Rietveld refinement .....	19
2. Thermal stability of $\text{LiNi}_x\text{Mn}_y\text{Co}_z\text{O}_2$ as function of Ni/Mn/Co composition .....	19
3. Development of new cathode materials .....	20
Section 2. Research results .....	20
1. Structural analyses using Rietveld refinement .....	20
2. Thermal stability of $\text{LiNi}_x\text{Mn}_y\text{Co}_z\text{O}_2$ as function of Ni/Mn/Co composition .....	21
3. Development of new cathode materials .....	22
<b>Chapter 3. Ripple effects and expected effects</b> .....	25
<b>Section 4 Reference</b> .....	29

---

# 목 차

---

요약문 .....	5
<b>제1장 연구개발의 목적 및 필요성 .....</b>	<b>13</b>
제1절 기술적 측면 .....	15
제2절 경제·산업적 측면 .....	16
제3절 사회·문화적 측면 .....	16
<b>제2장 연구개발수행 내용 및 결과 .....</b>	<b>17</b>
제1절 연구 수행 내용 .....	19
1. Rietveld refinement를 이용한 시료별 정밀 조성 분석 .....	19
2. 삼원계 리튬 산화물 조성에 따른 열안정성 분석 .....	19
3. 신규양극재료 개발 .....	20
제2절 연구 수행 결과 .....	20
1. Rietveld refinement를 이용한 시료별 정밀 조성 분석 .....	20
가. VX0934 .....	20
나. VX0936 .....	20
다. VX0937 .....	20
라. VX0934, VX0936, VX0937 샘플의 Li diffusion visualization .....	21
2. 삼원계 리튬 산화물 조성에 따른 열안정성 분석 .....	21
3. 신규양극재료 개발 .....	22
가. $\text{Na}_7\text{V}_3(\text{P}_2\text{O}_7)_4$ .....	22
제3절 파급효과 및 기대효과 .....	23
<b>제 3 장 참고문헌 .....</b>	<b>25</b>
서지정보양식 .....	29

---

## 그림 목차

---

그림 1. 이차전지의 시장동향 및 연평균 성장률 (출처: 한국전지연구조합) .....	15
그림 2. Ni, Mn, Co 조성에 따라 변화하는 $\text{Li}(\text{Ni}_x\text{Co}_y\text{Mn}_z)\text{O}_2$ (NCM)의 중성자 회절 패턴 .....	19
그림 3. Li-Ni site exchange에 따라 변화하는 $\text{Li}(\text{Ni}_x\text{Co}_y\text{Mn}_z)\text{O}_2$ (NCM)의 중성자 회절 패턴 .....	19
그림 4. VX0934 구조분석 .....	21
그림 5. VX0936 구조분석 .....	21
그림 6. VX0937 구조분석 .....	21
그림 7. Maximum entropy method (MEM)을 이용한 샘플의 Li diffusion path 시각화 .....	21
그림 8. $\text{Li}(\text{Ni}_{0.3}\text{Co}_{0.3}\text{Mn}_{0.3})\text{O}_2$ (NCM 333) 열안정성 평가 .....	22
그림 9. $\text{Li}(\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.2}\text{Mn}_{0.3})\text{O}_2$ (NCM 523) 열안정성 평가 .....	22
그림 10. $\text{Li}(\text{Ni}_{0.6}\text{Co}_{0.2}\text{Mn}_{0.2})\text{O}_2$ (NCM 622) 열안정성 평가 .....	22
그림 11. $\text{Li}(\text{Ni}_{0.8}\text{Co}_{0.1}\text{Mn}_{0.1})\text{O}_2$ (NCM 811) 열안정성 평가 .....	22
그림 12. $\text{Na}_7\text{V}_3(\text{P}_2\text{O}_7)_4$ 구조 .....	23
그림 13. $\text{Na}_7\text{V}_3(\text{P}_2\text{O}_7)_4$ 전기화학 특성 평가 .....	23



## 제1장

# 연구개발의 목적 및 필요성

제1절 기술적 측면

제2절 경제·산업적 측면

제3절 사회·문화적 측면

KAERI





## 제1절 기술적 측면

- 이차전지는 편리성, 친환경성의 우수한 특성으로 인하여 휴대폰, 노트북 등의 소형기기에 서부터 대형의료기기 및 전기 자동차 등의 중대형 기기에 이르기 까지 다양한 에너지 공급원으로 사용됨.
- 세계 이차 전지 시장의 규모는 2010년 110억불에서 2018년 400억불로 4배가량의 큰 급격한 팽창이 예상이 되며 이차 전지 시장 규모의 증가분 중 특히 전기자동차와 같은 중대형 에너지 저장용 시장 확대가 큰 부분을 차지할 것으로 예상됨.

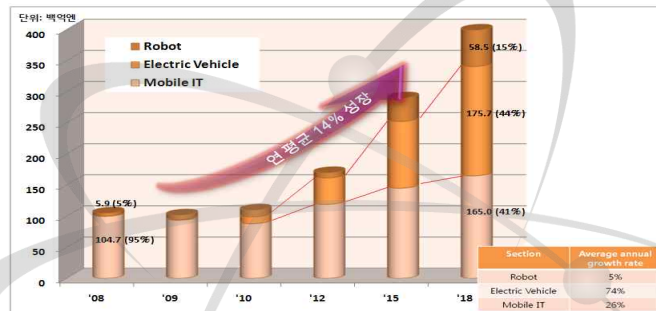


그림 1 이차전지의 시장동향 및 연평균 성장률 (출처: 한국전지연구조합)

- 이러한 중대형 전지로의 시장 확대를 위해 고용량/고안정성의 양극소재의 개발이 필수적인 상황임.
- 기존에 큰 관심을 보이는 Ni-rich 리튬산화물 양극소재는 용량을 만족시키지만 구조적 안전성의 개선이 필요하며 안정적인 격자 구조를 가지는 신규 양극재료 개발 또한 필수적인 상황임.
- 하지만 이차전지 특성 향상을 위한 원천기술 미확보로 인한 차세대 이차전지 개발의 국제 경쟁력이 상실되어 가고 있음.
- 현재 국내 이차전지 종사 기업들의 기술 수준은 단순한 합성 또는 표면개질에 의한 특성 향상에 집중하고 있으나 이는 원천특허 획득이 어려울 뿐만 아니라 intrinsic한 전극재료 특성을 바꿀 수 없기 때문에 근본적으로 우수한 특성을 가지는 신규 재료의 개발 및 개선이 필수적인 상황임. 이를 위해서는 회절분석을 통한 미시적 관점에서의 전극물질의 격자 구조 이해가 반드시 필요함.
- 이를 위해 이차전지 전극 재료 내 원소들의 미시적 구조분석이 가능한 X선 및 중성자 회절 패턴의 Rietveld Refinement를 통한 리튬이온 이차전지용 양극재료의 격자 구조분석

이 필수적인 상황임.

## 제2절 경제·산업적 측면

- X-선 및 중성자회절 기반의 고도분석 기술 개발 및 기업으로의 기술이전을 통해 리튬이차전지 차세대 전극소재 개발과 전지 산업 국제 경쟁력 확보.
- 결정구조 고도분석기술을 바탕으로 현재 리튬이차전지 전극소재의 대부분을 외국에서 수입하는 현실에서 고용량 리튬이차전지용 전극소재의 국산화를 이끌 것이며, 차세대전지개발과 관련된 고도 분석기술 연구도 비례하여 증가할 것으로 전망.



## 제3절 사회·문화적 측면

- 환경오염 문제가 대두되면서 친환경자동차에 대한 수요가 늘어가고 있는 상황에서 현재 전기 자동차가 가장 큰 관심을 받으며 개발 중에 있음.
- 전기자동차의 메인 에너지저장매체는 리튬이차전지로, 리튬이차전지 개발은 도시에서 매연과 소음을 없애고 자연 친화적 환경을 조성하는데 큰 도움을 줄 것으로 전망.

## 제2장

# 연구개발수행 내용 및 결과

제1절 연구 수행 내용

제2절 연구 수행 결과

제3절 파급효과 및 기대효과

KAERI



## 제1절 연구 수행 내용

### 1. Rietveld refinement를 이용한 시료별 정밀 조성 분석

- 기업에서 분석을 의뢰한 물질들 (VX0934, VX0936, VX0937)은 서로 다른 온도에서 합성된 삼원계 리튬 산화물로 Ni, Co, Mn 이 혼합되어 있으며, 이들 전이금속 조성 변화에 따라 전기화학특성이 크게 변화하므로 정확한 조성 분석이 필수적임.
- $\text{Li}^+$  이온과  $\text{Ni}^{2+}$  이온은 크기가 비슷하여 쉽게 위치를 치환할 수 있다. 이는 Li 이온의 원활한 이동을 막기 때문에 전기화학특성에 부정적 영향을 미쳐 물질에서 Li-Ni site exchange 비율을 정확히 아는 것이 중요함.
- 중성자는 X선과 달리 Li을 쉽게 관찰 할 수 있으며 Ni, Co, Mn과 같이 인접한 원소들을 쉽게 구별 할 수 있기 때문에 기업에서 제공한 물질의 조성을 확인하는데 유리함.

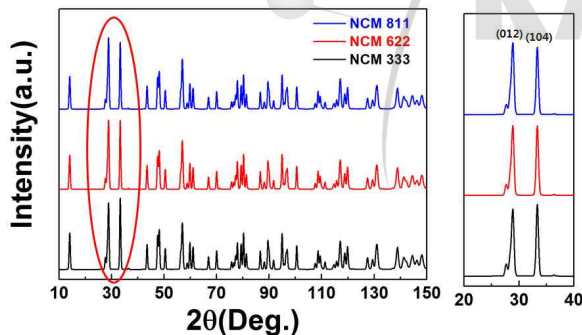


그림 2 Ni, Mn, Co 조성에 따라 변화하는  $\text{Li}(\text{Ni}_x\text{Co}_y\text{Mn}_z)\text{O}_2$  (NCM)의 중성자 회절 패턴

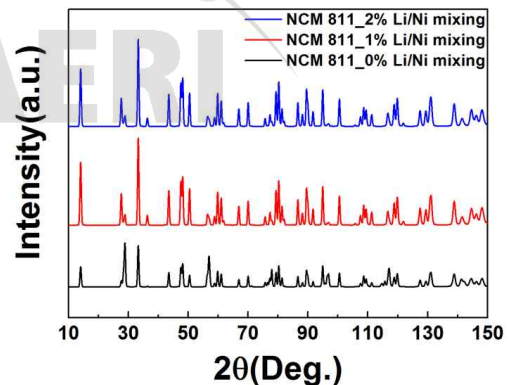


그림 3 Li-Ni site exchange에 따라 변화하는  $\text{Li}(\text{Ni}_x\text{Co}_y\text{Mn}_z)\text{O}_2$  (NCM)의 중성자 회절 패턴

### 2. 삼원계 리튬 산화물 조성에 따른 열안정성 평가

- 리튬이차전지 폭발 가능성을 알기 위한 열안정성 평가는 상용화에 있어 가장 중요함.
- 조성에 따른 삼원계 리튬 산화물의 열안정성을 평가하여 어떠한 물질이 상용화에 가장 적합한지 판단함.

### 3. 신규양극재료 개발

- 기존에 보고된 양극재료의 경우 이미 특허 선점으로 인해 이용 시 높은 로열티 지불이 필수적인 상황임.
- 로열티에 의한 가격 상승은 제품의 경쟁력을 떨어뜨리는 주요 문제이기에 이를 해결하기 위한 신규양극재료의 개발이 필수적인 상황임.
- 특히 대용량 에너지저장매체의 관심이 커지면서 리튬이차전지보다 값싼 소듐이차전지가 큰 관심을 보이며 연구 중이지만 이에 대한 연구는 아직 기초적인 수준이기에 소듐이차전지에 대한 기술선점이 필수적인 상황임.
- 높은 전압과 높은 수명특성을 가지는 신규양극재료 개발을 진행함.

## 제2절 연구 수행 결과

### 1. Rietveld refinement를 이용한 시료별 정밀 조성 분석

#### 가. VX0934

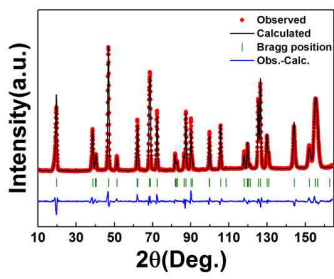
- 본 샘플의 중성자 회절 분석 결과는 아래와 같으며, Rietveld refinement를 통해 계산된 조성은  $(\text{Li}_{0.930}\text{Ni}_{0.046})(\text{Ni}_{0.759}\text{Mn}_{0.1}\text{Co}_{0.1}\text{Li}_{0.042})\text{O}_2$  으로 이는 Induced coupled plasma (ICP)를 통해 측정된 값과 동일함.
- 약 4.6%의 Li-Ni site exchange가 발생했음을 확인함.

#### 나. VX0936

- 본 샘플의 중성자 회절 분석 결과는 아래와 같으며, Rietveld refinement를 통해 계산된 조성은  $(\text{Li}_{0.942}\text{Ni}_{0.044})(\text{Ni}_{0.756}\text{Mn}_{0.1}\text{Co}_{0.1}\text{Li}_{0.042})\text{O}_2$  으로 이는 Induced coupled plasma (ICP)를 통해 측정된 값과 동일함.
- 약 4.4%의 Li-Ni site exchange가 발생했음을 확인함.

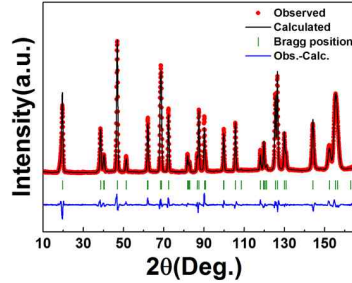
#### 다. VX0937

- 본 샘플의 중성자 회절 분석 결과는 아래와 같으며, Rietveld refinement를 통해 계산된 조성은  $(\text{Li}_{0.936}\text{Ni}_{0.042})(\text{Ni}_{0.758}\text{Mn}_{0.1}\text{Co}_{0.1}\text{Li}_{0.042})\text{O}_2$  으로 이는 Induced coupled plasma (ICP)를 통해 측정된 값과 동일함.
- 약 4.2%의 Li-Ni site exchange가 발생했음을 확인함.



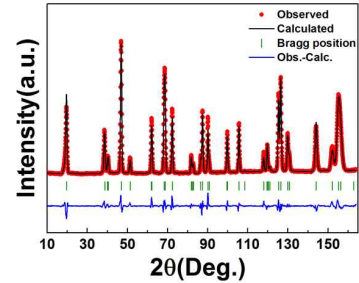
Atom	Multiplicity	x	y	z	Biso	Occupancy
Li1	3	0.00000	0.00000	0.50000	0.14(5)	0.942(9)
N2	3	0.00000	0.00000	0.50000	0.14(5)	0.048(3)
N2	3	0.00000	0.00000	0.00000	0.288(19)	0.756(6)
Mn1	3	0.00000	0.00000	0.00000	0.288(19)	0.10(2)
Co1	3	0.00000	0.00000	0.00000	0.288(19)	0.10(2)
Li2	3	0.00000	0.00000	0.00000	0.288(19)	0.042(2)
O1	6	0.00000	0.00000	0.25869(9)	0.84(2)	1

Atomic composition:  $(\text{Li}_{0.942}\text{Ni}_{0.048})(\text{Ni}_{0.756}\text{Mn}_{0.1}\text{Co}_{0.1}\text{Li}_{0.042})\text{O}_2$



Atom	Multiplicity	x	y	z	Biso	Occupancy
Li1	3	0.00000	0.00000	0.50000	0.08(5)	0.936(12)
N2	3	0.00000	0.00000	0.50000	0.08(5)	0.046(2)
N2	3	0.00000	0.00000	0.00000	0.231(12)	0.756(4)
Mn1	3	0.00000	0.00000	0.00000	0.231(12)	0.10(1)
Co1	3	0.00000	0.00000	0.00000	0.231(12)	0.10(2)
Li2	3	0.00000	0.00000	0.00000	0.231(12)	0.042(2)
O1	6	0.00000	0.00000	0.25893(5)	0.788(14)	1

Atomic composition:  $(\text{Li}_{0.936}\text{Ni}_{0.046})(\text{Ni}_{0.756}\text{Mn}_{0.1}\text{Co}_{0.1}\text{Li}_{0.042})\text{O}_2$



Atom	Multiplicity	x	y	z	Biso	Occupancy
Li1	3	0.00000	0.00000	0.50000	0.11(5)	0.930(10)
N2	3	0.00000	0.00000	0.50000	0.11(5)	0.046(2)
N2	3	0.00000	0.00000	0.00000	0.262(11)	0.758(4)
Mn1	3	0.00000	0.00000	0.00000	0.262(11)	0.10(1)
Co1	3	0.00000	0.00000	0.00000	0.262(11)	0.10(1)
Li2	3	0.00000	0.00000	0.00000	0.262(11)	0.042(2)
O1	6	0.00000	0.00000	0.25827(5)	0.812(14)	1

Atomic composition:  $(\text{Li}_{0.930}\text{Ni}_{0.046})(\text{Ni}_{0.758}\text{Mn}_{0.1}\text{Co}_{0.1}\text{Li}_{0.042})\text{O}_2$

그림 4 VX0934 구조분석

그림 5 VX0936 구조분석

그림 6 VX0937 구조분석

### 라. VX0934, VX0936, VX0937 샘플의 Li diffusion visualization

- Maximum entropy method (MEM)을 이용하여 샘플들의 격자 구조 내 존재하는 Li의 위치를 visualization 하고 이를 통해 물질의 Li diffusion 가능성을 판단함.
- Rietveld refinement를 통해 계산된 것과 같이 Li/Ni site-mixing이 관찰되며 이는 기존의 Li diffusion path와 연결 없이 국부적으로 국한되어 있음을 확인함.

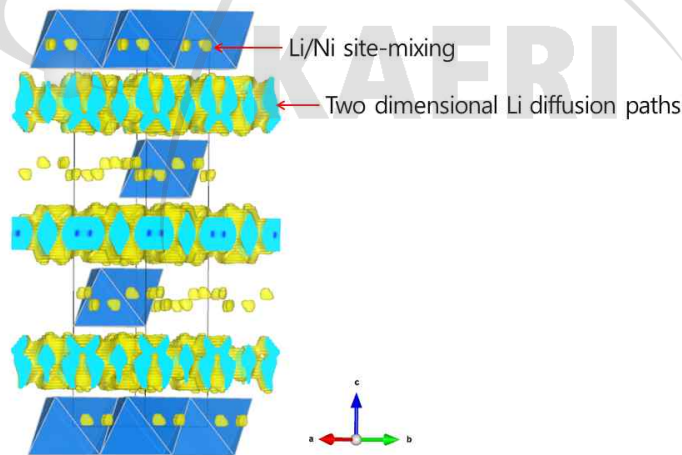


그림 7 Maximum entropy method (MEM)을 이용한 샘플의 Li diffusion path 시각화

## 2. 삼원계 리튬 산화물 조성에 따른 열안정성 평가

- NCM 333, 532, 622 조성 물질은 약 1063K (790°C) 근처에서 상 변형이 발견되었고, NCM 811 조성은 약 973K (500°C)에서 상 변형이 발견됨.

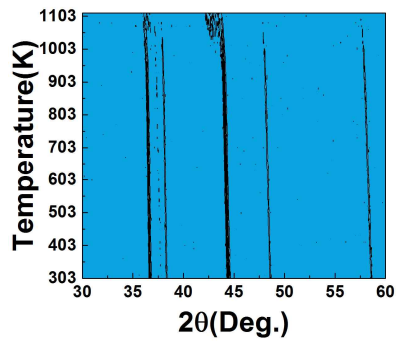


그림 8  $\text{Li}(\text{Ni}_{0.3}\text{Co}_{0.3}\text{Mn}_{0.3})\text{O}_2$  (NCM 333) 열안정성 평가

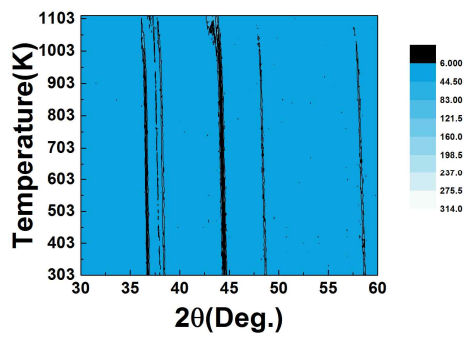


그림 9  $\text{Li}(\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.2}\text{Mn}_{0.3})\text{O}_2$  (NCM 523) 열안정성 평가

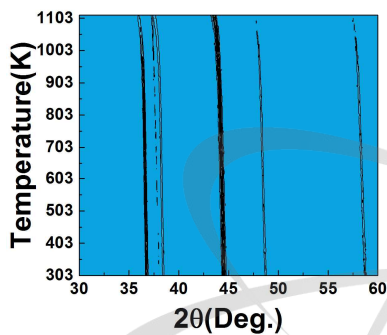


그림 10  $\text{Li}(\text{Ni}_{0.6}\text{Co}_{0.2}\text{Mn}_{0.2})\text{O}_2$  (NCM 622) 열안정성 평가

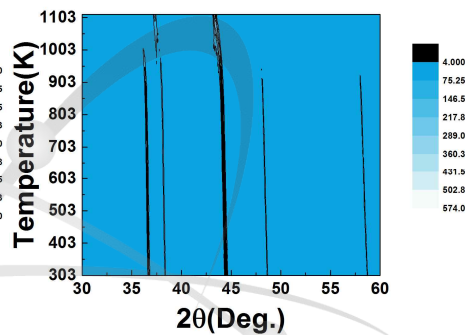


그림 11  $\text{Li}(\text{Ni}_{0.8}\text{Co}_{0.1}\text{Mn}_{0.1})\text{O}_2$  (NCM 811) 열안정성 평가

### 3. 신규양극재료 개발

#### 가. $\text{Na}_7\text{V}_3(\text{P}_2\text{O}_7)_4$

- 4V 급 고전압 및 고수명을 가지는 신규 양극재료를 세계 최초로 합성하고 이에 대한 전기화학특성을 평가함
- 물질에 대한 논문 게재 및 국내 특허 출원 중.



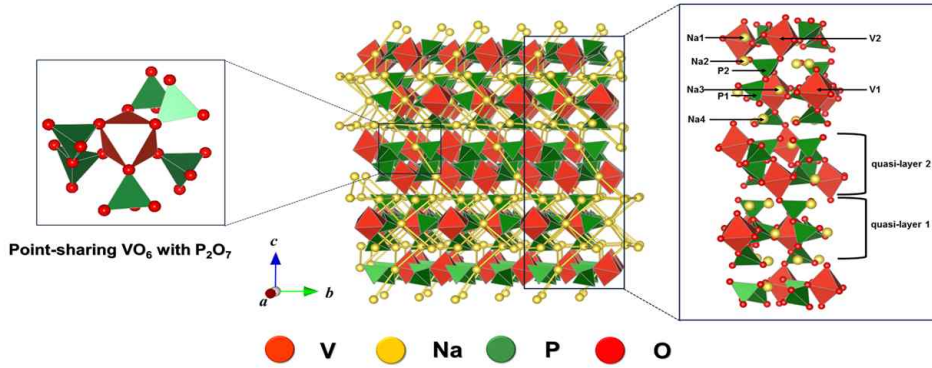


그림 12  $\text{Na}_7\text{V}_3(\text{P}_2\text{O}_7)_4$  구조

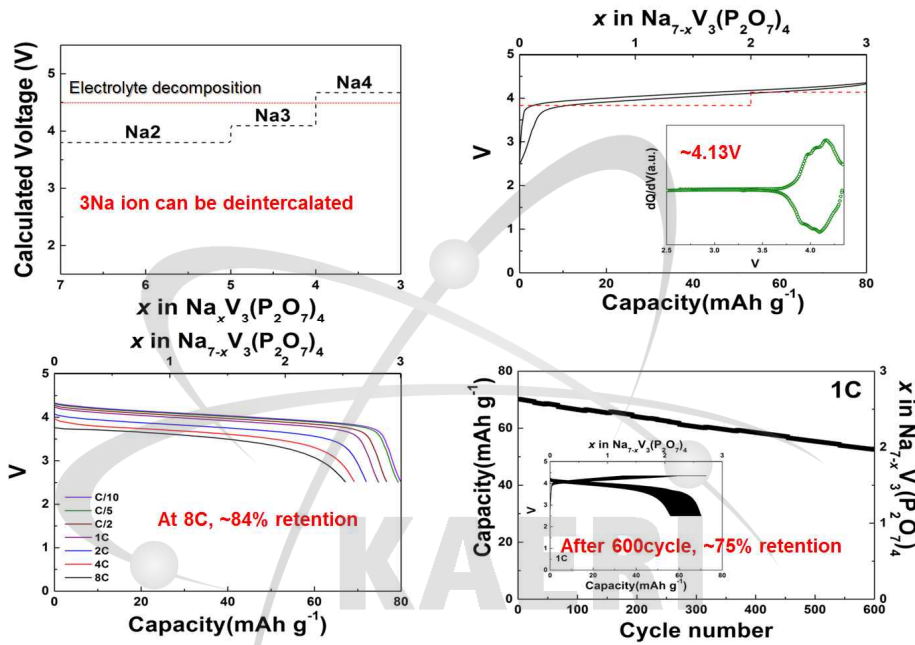


그림 13  $\text{Na}_7\text{V}_3(\text{P}_2\text{O}_7)_4$  전기화학 특성 평가

(Ref. J. Kim et al, Adv Energy Mater., 6, 1502147 (2016))

### 제3절 파급효과 및 기대효과

- 국내 이차전지 산업은 LG화학, 삼성 SDI, SK이노베이션 등 공정 조립 업체를 중심으로 중소, 벤처기업 형태의 소재와 장비 업체 등 약 30여개 업체로 구성되어 있으나, 이차전지의 양극소재 원천 제조 기술이 취약하여 수입 의존율이 약 80~85% 정도에 이르고 있음.
- 고용량 이차전지 재료개발을 위한 대한 차세대 분석기술력 확보는 기술 확보 자체로의 효과뿐만 아니라 관련되는 미래 산업의 발전 속도를 더욱 가속화시키는 중추적인 역할을

할 것이며, 또한 본 연구 수행에 의하여 고용량 이차전지재료 개발기술을 획득함으로써 기술 경쟁력 확보와 예상되는 특허권 분쟁에서 유리한 위치를 차지하는 무형의 경제적 효과가 있을 것으로 예상됨.



## 제3장

### 참고문헌





- [1] J. Kim, I. Park, H. Kim, K.-Y. Park, Y.-U. Park, K. Kang "Tailoring a New 4V-Class Cathode Material for Na-Ion Batteries," Adv. Energy Mater., 6 1502147 (2016).





## 서지정보양식

KAERI보고서번호	KAREI/RR-4144/2016	보고서 종류	연구보고서
제 목 / 부 제	고성능 이차전지 양극재료 개발 지원		
연구 책임자 및 부서명	이성수/중성자과학연구부		
연구자 및 부서명	김종순/중성자장치개발관리부 김형섭/중성자과학연구부 송기명/중성자과학연구부		
출 판 지	대전	발 행 일	2017.02.07
		총 페이지(서문+본문)	30p.
공 개 여 부	공개( O ), 비공개( )		참고사항 표( 0 )개, 그림( 13 )개, 참고문헌( 1 )개
비 밀 여 부	대외비( ), _ 급 비밀		
INIS 공개여부	공개( O ), 비공개( )		
초록 (15-20줄 내외)			
<p>이차전지 특성 향상을 위한 원천기술 미확보로 인한 차세대 이차전지 개발의 국제 경쟁력이 상실되어 가고 있다. 이를 해결하기 위해 새로운 전극 소재 개발에 필수적인 격자구조 연구를 적용한 신소재합성기술의 돌파구가 필요한 상황이지만 기초 연구가 취약한 기존의 단순 합성 기술만 가지고는 중/대용량 이차전지용 차세대 전극 재료 개발이 불가능한 상황이다. 본 연구의 주된 연구 방법인 X선/중성자 회절 실험은 물질의 격자 구조를 미시적인 관점에서 연구하는데 최적의 연구방법이다. 회절 실험을 통한 격자구조 분석은 소재의 물성 향상과 신소재 개발의 방향을 결정하는 매우 중요한 기술로서, 리튬이차전지 연구에 있어서 전지특성을 결정하는 리튬 이온이 어떻게 이동하고 어떤 위치에 있는 지를 확인 할 수 있는 유일한 실험 방법이다. 본 연구에서는 이차전지용 신규 전극물질(양극소재) 개발을 위해 회절을 이용한 구조 분석 기술을 특화시켜 적용하는 고도구조분석 기술 및 실시간 충/방전 기술을 X선 회절 실험에 적용하여 충전 및 방전 시 리튬의 삽입 및 탈리에 따른 구조 안정성 평가기술을 개발하였고 기존에 알려지지 않았던 우수한 특성을 가지는 신규 이차전지 양극소재를 개발하였다. 본 연구 수행에 의하여 고용량 이차전지 재료 개발기술을 획득함으로써 기술 경쟁력 확보와 예상되는 특허권 분쟁에서 유리한 위치를 차지하는 경제적 효과가 있을 것으로 예상된다.</p>			
주제명키워드 (10단어내외)	리튬이차전지, 소듐이차전지, X선 회절, 중성자 회절, 양극재료, 전극재료, 열안정성		

## BIBLIOGRAPHIC INFORMATION SHEET

KAERI Report No.	KAREI/RR-4144/2016	Report Type	Research Report
Title / Subtitle	Supporting to develop the new cathode materials for high-performance Li-ion batteries		
Project Manager and Department	Seongsu Lee/Neutron Science Division		
Researcher and Department	Jongsoon Kim/Neutron Instrumentation Division Hyungsub Kim/Neutron Science Division Ki-Myung Song/Neutron Science Division		
Publication Place	Daejeon	Date of Publication	2017.02.07
			Total number of page
Open	Open( O ), Closed ( )		30p.
Classified	Restricted( ), __Class Document		Reference Tabs. ( 0 ) Figs. ( 13 ) Refs. ( 1 )
INIS Open	Open( O ), Closed ( )		
Abstract (15-20 Lines)			
<p>Environmental concerns such as oil exhaustion or green house effect have needed considerable efforts to design the eco-friendly vehicles such as electric vehicles. Li ion batteries have been considered as the best energy storage system for electric vehicles due to its high energy/power densities. Li ion battery market is explosively growing in the world and the aquisition of technologies and patents of Li ion batteries is very important issue. Using neutron/X-ray diffraction with Rietveld refinement and first principle calculation, we can develop novel electrode materials for Li ion batteries and post Li ion batteries such as Na ion batteries or All solid Li batteries more quickly and efficiently than the other researchers. We strongly believe that our researches can give big insights to develop and study new electrode materials for ion batteries.</p>			
Subject Keywords (About 10 words)	Li ion batteries, Na ion batteries, X-ray diffraction, Neutron diffraction, Cathode, Electrode, Thermal stability		





## 주 의

# KAERI

1. 이 보고서는 한국원자력연구원에서 시행한 중소·중견기업 기술혁신개발지원사업의 연구보고서입니다.
2. 이 보고서 내용을 발표하는 때에는 반드시 한국원자력연구원에서 시행한 중소·중견기업 기술혁신개발지원사업의 연구결과임을 밝혀야 합니다.
3. 국가과학기술 기밀유지에 필요한 내용은 대외적으로 발표하거나 공개하여서는 아니 됩니다.