

Workshop – 국내 중성자 활용 기술 현황 및 전망

고분해능 중성자 분말 회절장치 활용 이차전지 소재 연구 동향



14:10-14:35, 21 May, 2025

김형섭 | Hyungsub Kim (책임연구원, 공학박사)

한국원자력연구원, 중성자과학부

| Neutron Science Division, Korea Atomic Energy Research Institute

EMAIL hyungsubkim@kaeri.re.kr | **Mobile** +82-10-3846-1720



Contents

1. 고분해능 중성자 분말 회절장치 (HRPD) 개요 및 운영 현황

- HRPD 장치 재원 및 활용 현황
- KAERI 중성자기반이차전지연구센터 소개

2. 중성자 회절과 이차전지 소재 결정 구조 분석

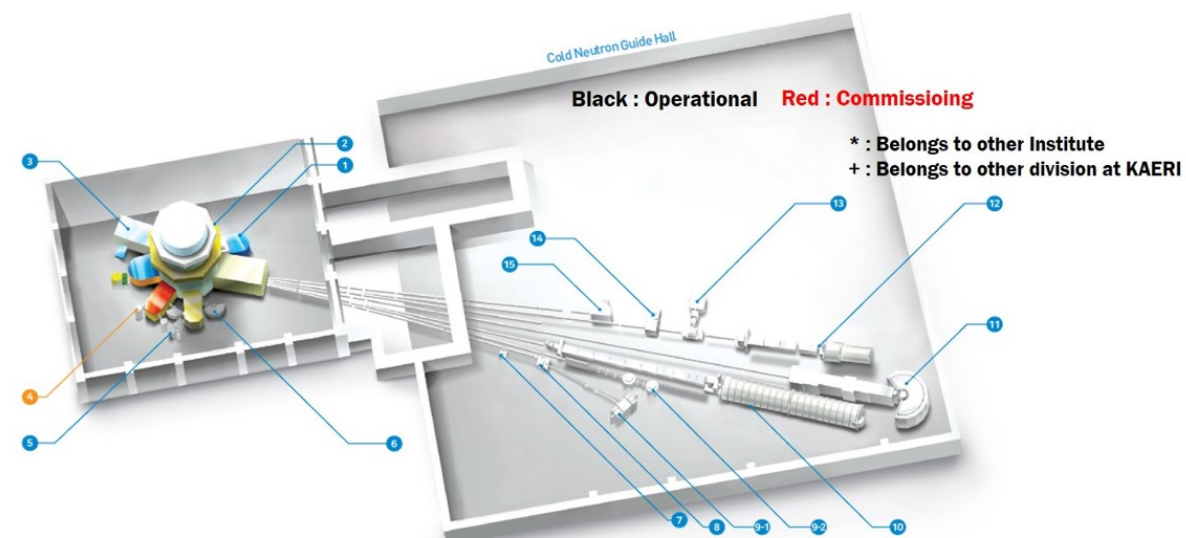
- 이차전지 소재 구조 분석 필요성
- 중성자 회절 활용 이차전지 소재 결정 구조 분석

3. HRPD 활용 이차전지 소재 결정 구조 연구 사례 소개

KAERI – 중성자과학부 | Neutron Science division

High-flux Advanced Neutron Application Reactor (HANARO)

- 30 MW Multi-purpose Research reactor since 1995
- Neutron Scattering, NAA, RI production, Irradiation Test, NTD



Neutron Science Division (~36)

- Principal Researcher: 12
- Senior Researcher: 3
- Post-docs/masters: 5
- Students: 5
- Engineers: 5, others: 6

Ph. D.

- Physics: 3
- Material Science: 5
- Geology and Mineralogy: 3
- Nuclear Engineering: 1
- Mechanical Engineering: 2
- Chemical Engineering: 1

01 Residual Stress Instrument

02 Ex-core Neutron irradiation Facility

03 Neutron Radiography Facility

*04 Bio-diffractometer with neutron image plate Camera(KRIBB)

05 Four Circle neutron Diffractometer

06 High Resolution Powder Diffractometer

07 Guide Test Station

08 Vertical type REflectometer

+09 Cold Neutron Activation Station

10 40m Small Angle Neutron Scattering instrument

11 Disk-Chopper Time-of-Flight spectrometer

12 18m Small Angle Neutron Scattering instrument

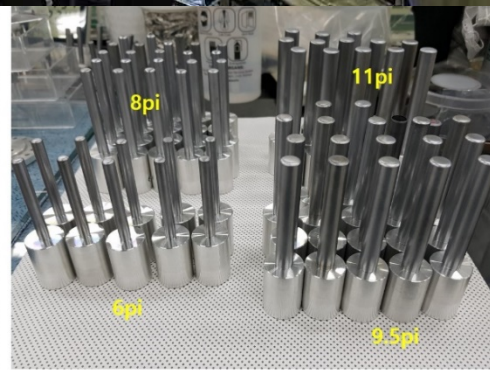
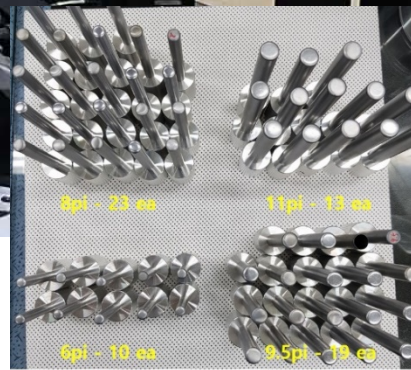
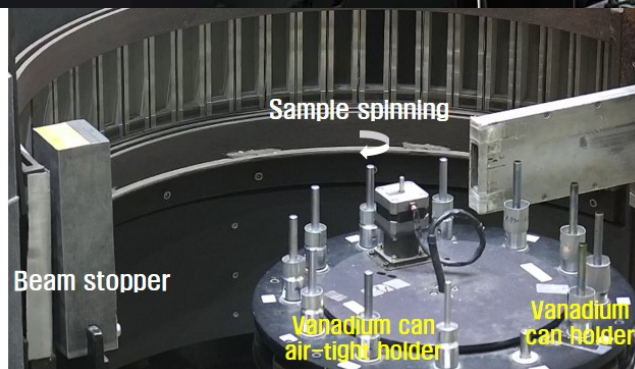
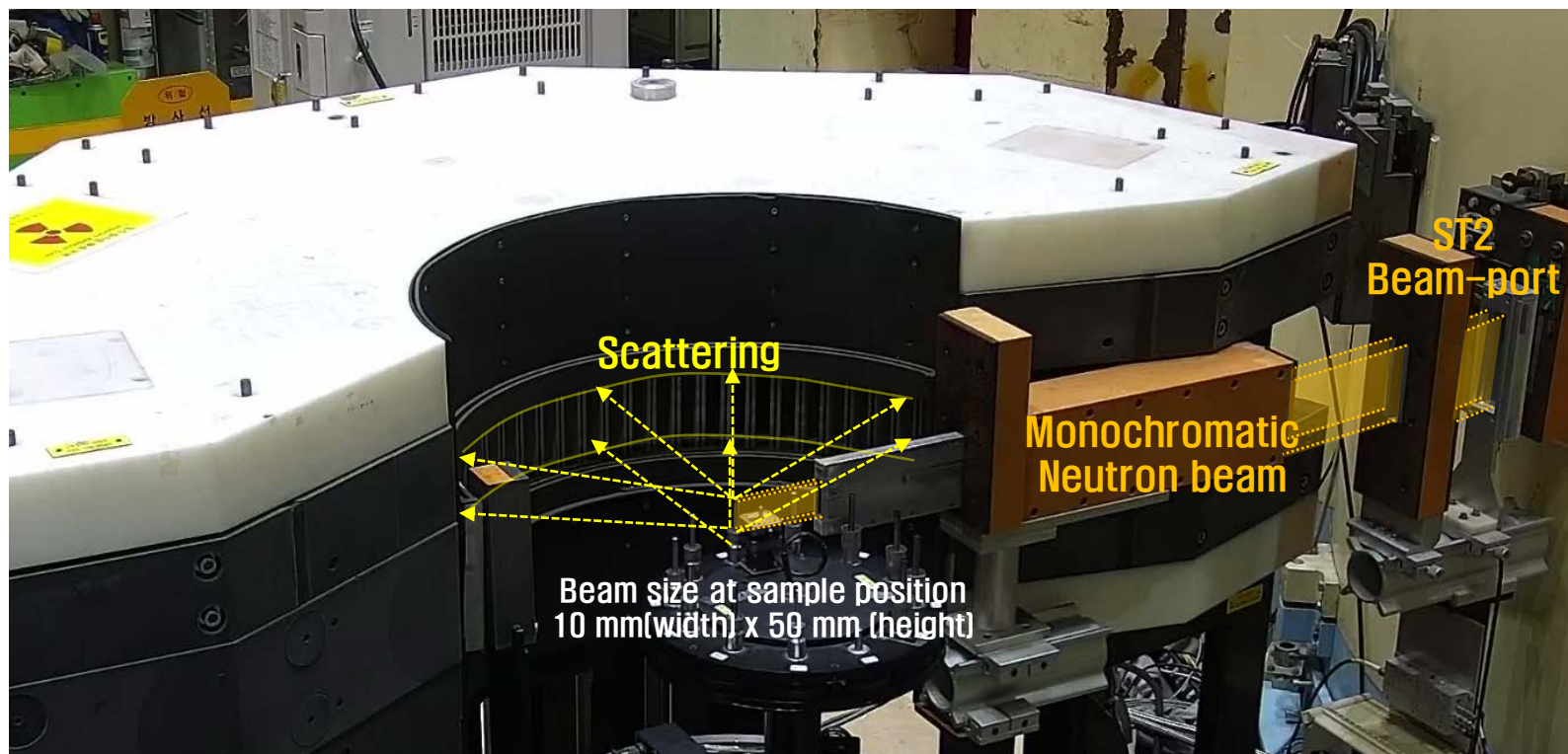
*13 KIST Ultra-Small Angle Neutron Scattering instrument

14 Bio-REflectometer

15 Cold neutron Triple-Axis Spectrometer

Among 12 KAERI instruments, we are operating intensively underlined 9 instruments

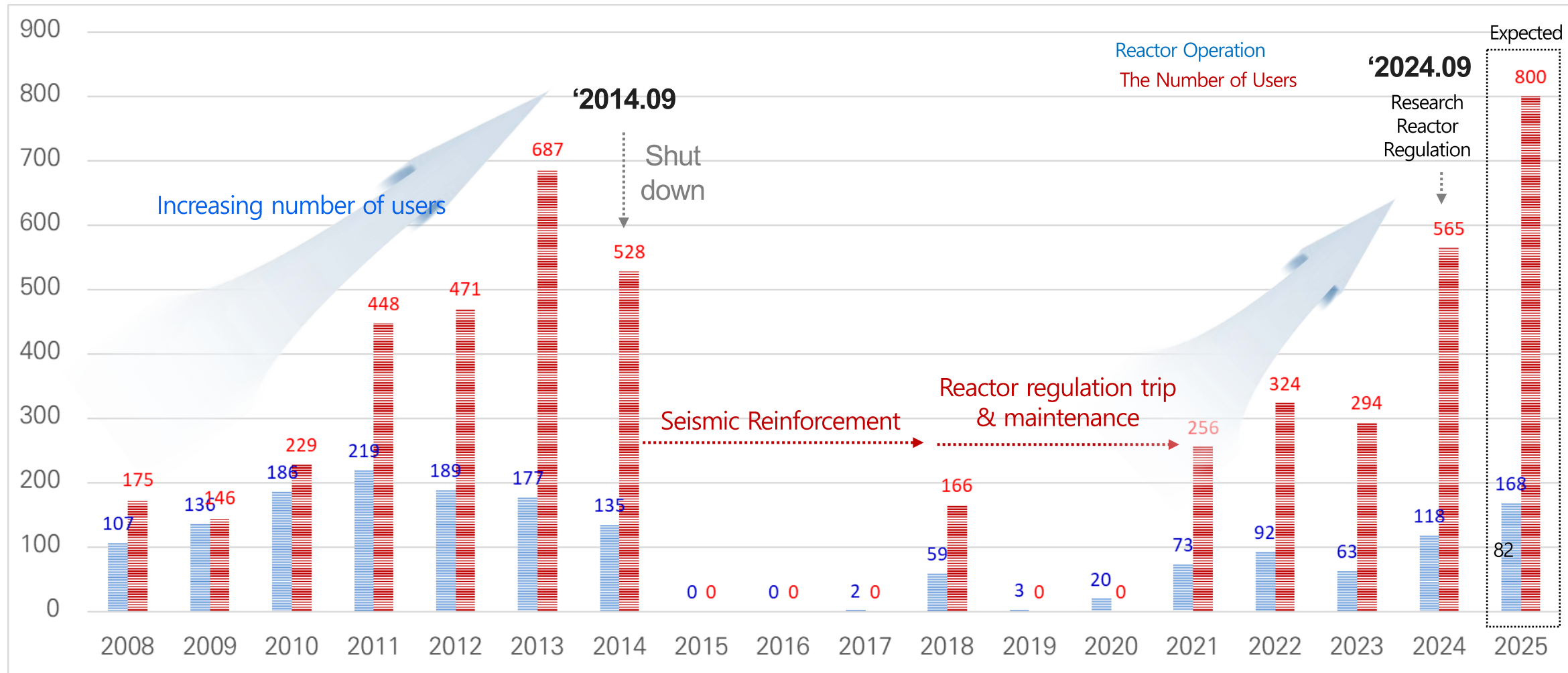
하나로 고분해능 중성자 분말 회절장치 (HRPD)



Part	Characteristic
Monochromator	Ge(331), Ge(335)
Wavelength	1.836Å
Resolution	$\Delta d/d > 0.2\%$
Neutron Flux at sample	$\sim 3.5 \times 10^6 \text{ n/cm}^2/\text{sec}$
Multi-detectors	32 He-3 proportional counters (tube: dia. 50mm)
PSD (position sensitive detectors)	1-D (100mm 200mm and 200mm 100mm), 2-D (200mm 200mm)
Take off angle	90°
Collimators	In-pile RSC (rotating shutter collimator) : 20', 30', open(~50') FCU (first collimator unit) : 6', 10', 20', open(~50') Second collimator : 30', open
Sample environments	Low Temperature Option - 4K CCR : RT to 4.5 K - Cryo furnace: 20K ~ 800 K - Dilution refrigerator & Super conducting magnet : ~50mK with 10 Tesla High Temperature Option - Furnace: up to 950 K - ILL furnace: up to 1800 C In-situ Option - Furnace + UGA(gas spectrometer) - Pressure cell: up to 10 Kbar - In-situ battery (18650)

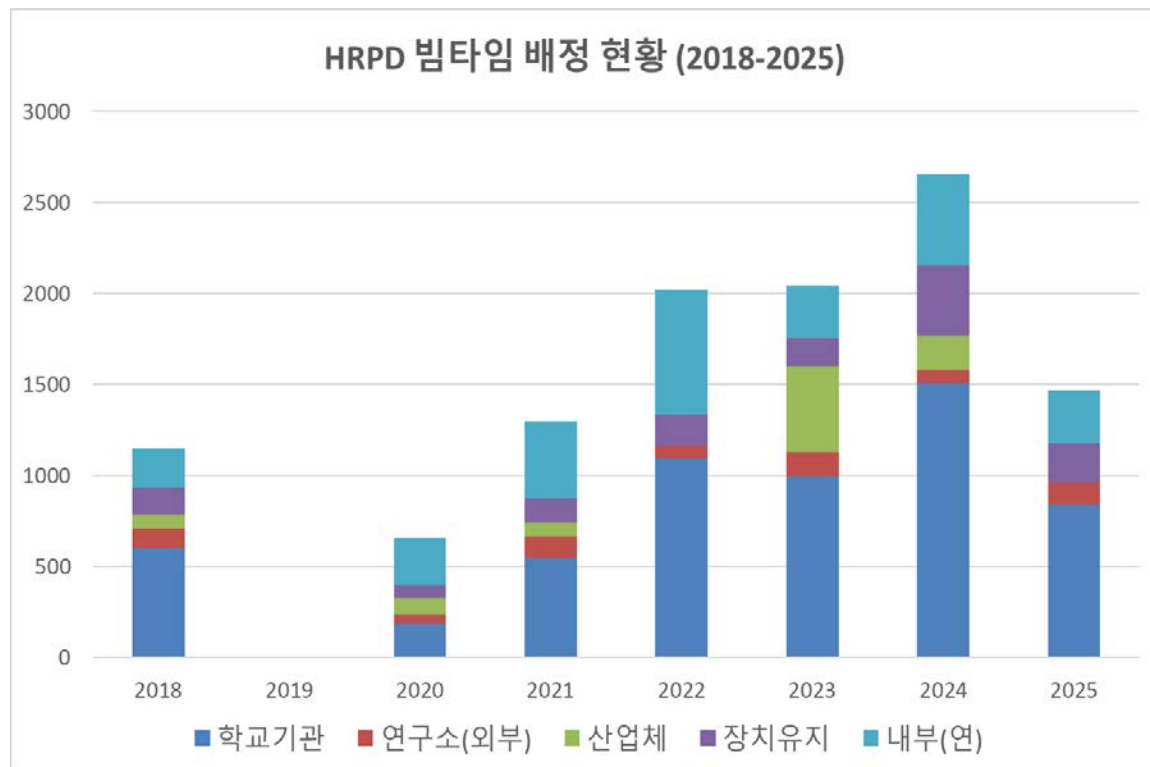
HANARO Operation Days

HANARO Operation Days and The Number of Users

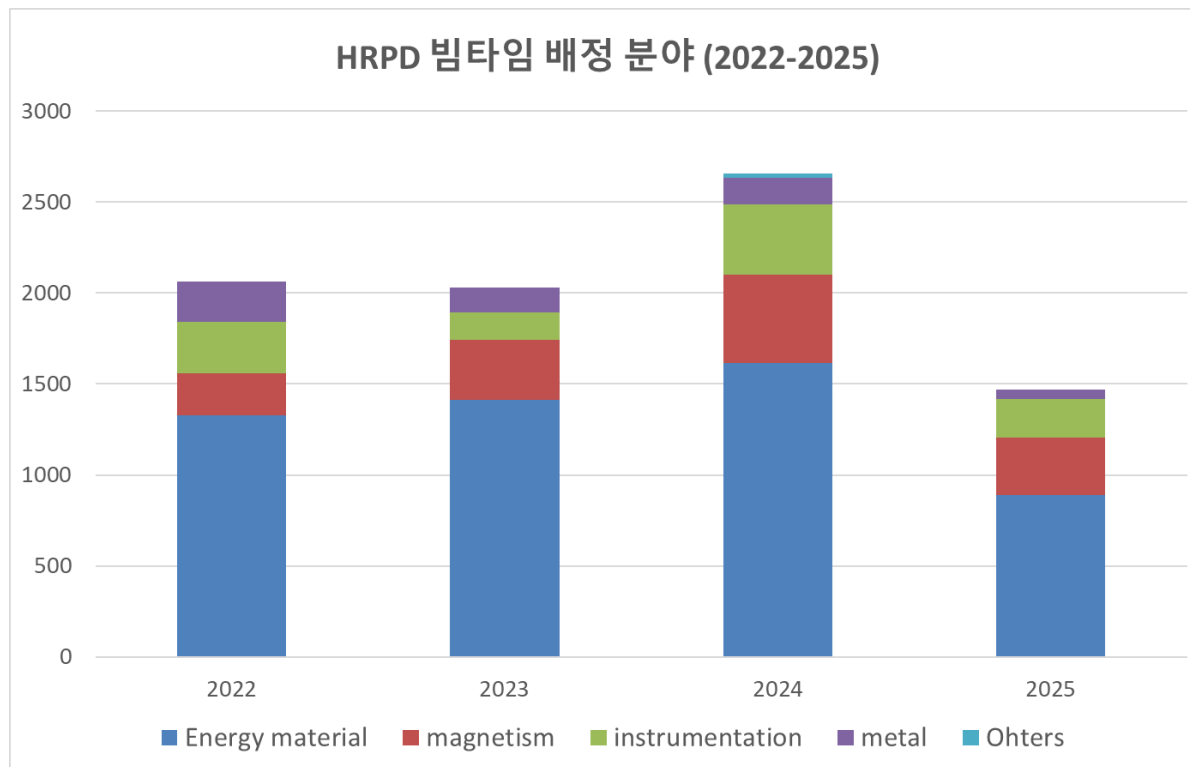


HANARO HRPD Research Area (Beam Time)

- HRPD Users (Beam Time, hours)

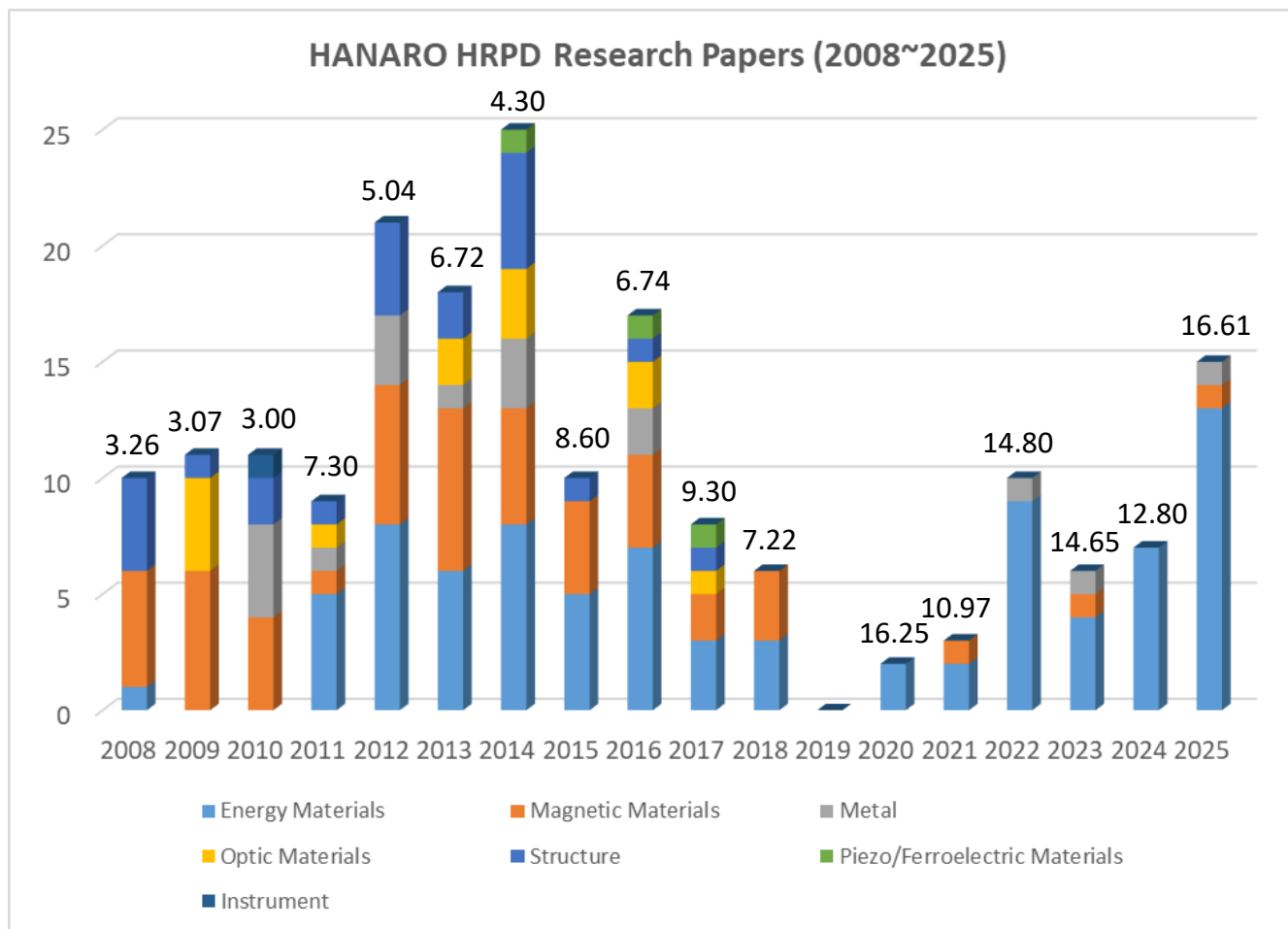


- HRPD Research Area (Beam Time, hours)

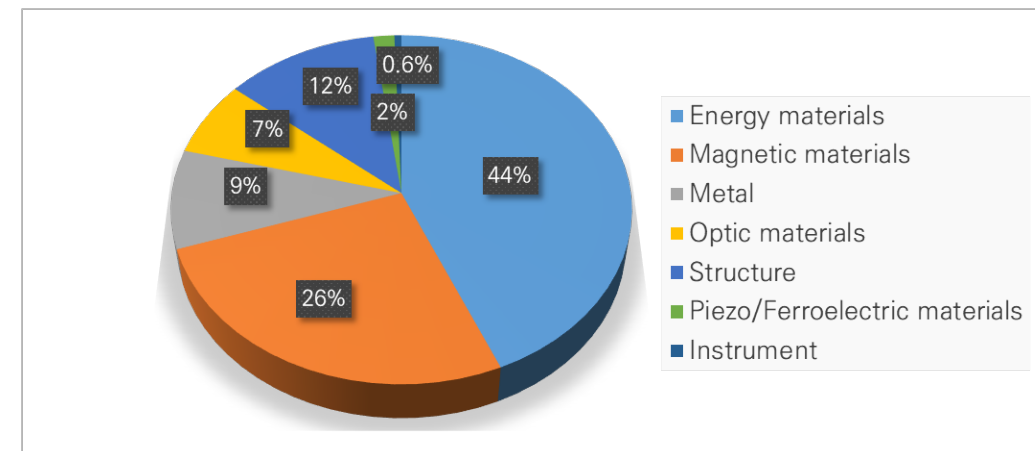


HANARO HRPD Research Area (Publications)

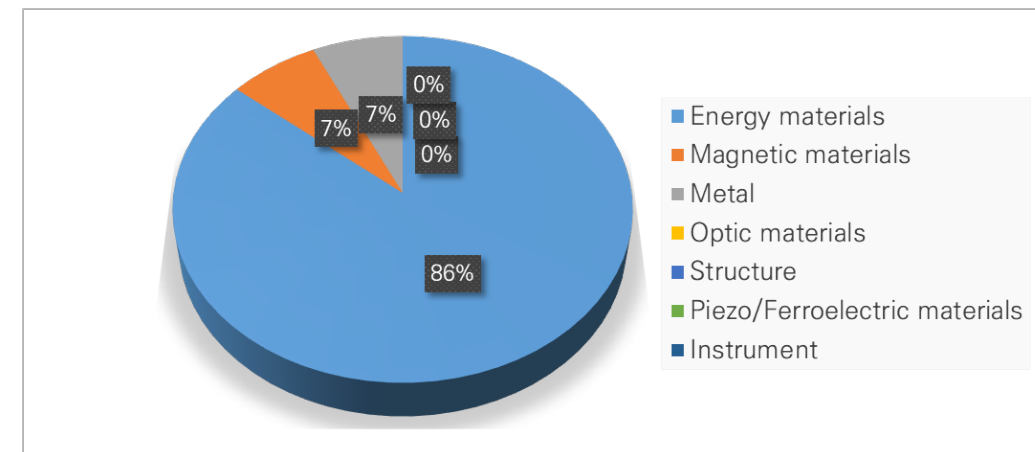
• Publications



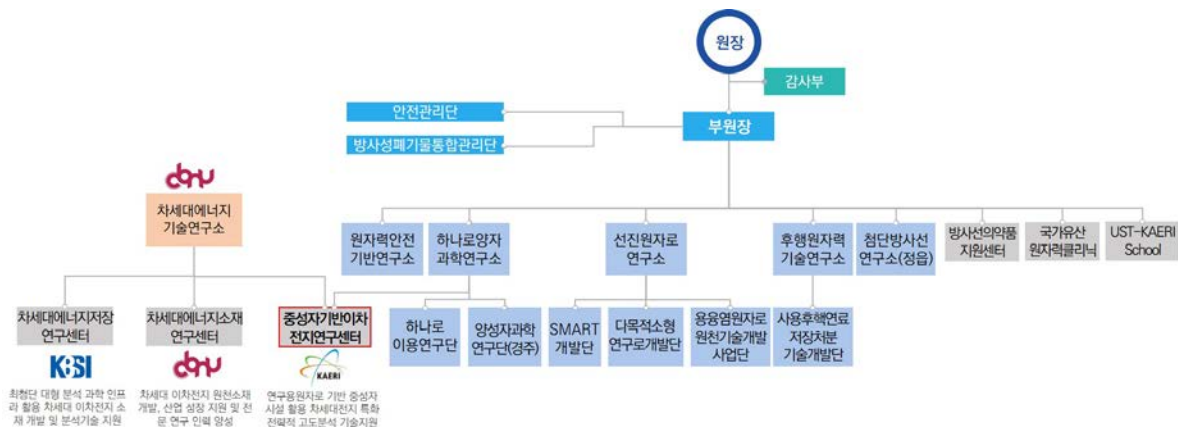
• 2008~2025



• 2018~2025



중성자 기반 이차전지 연구 센터 (NRRC)



고도분석기술 기반 차세대 이차전지 소재 플랫폼 구축사업단

충북대, KBSI, 지자체 (충청북도, 청주시), 이차전지 기업, 혁신기관 등

한국원자력연구원 (KAERI)

'중성자기반이차전지연구센터'

10명

신기술개발 운영팀

- 고도 분석 기술 발굴/검토
- 실시간 분석 환경 구축
- 양극 소재 개발
- 기업 분석 지원
- 고도 분석 시스템 구축
- 수요 조사 및 성과 확산

※ KAERI 중성자과학부 주도, 하나로이동부 지원

3명

인력양성 운영팀

- 석·박사 학위 인력 양성
- 여름/겨울학교 기획 및 운영
- 학부 인턴 교육
- 산업체 교육
- 고도 분석 실습 환경 구축
- 교육 시스템 구축

※ KAERI 중성자과학부 주도, 원자력 교육센터 지원

2명

기술사업화 운영팀

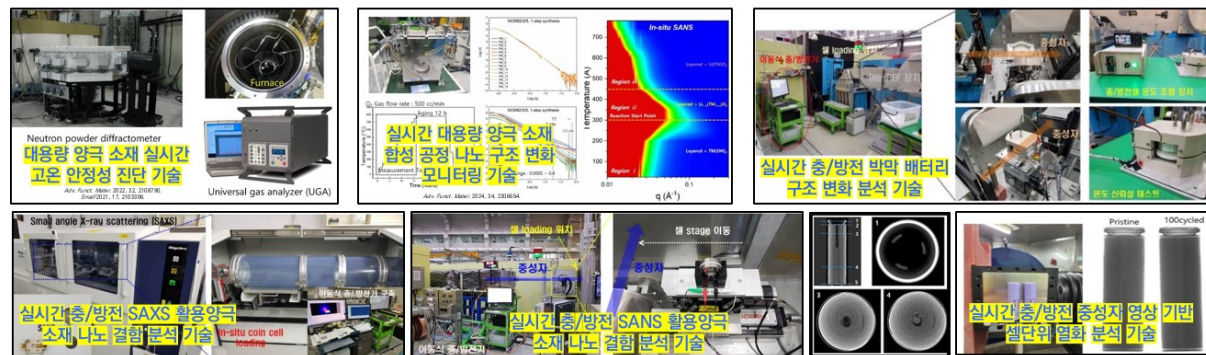
- 기술 수요 조사
- 기보유 특허 기술이전 검토
- 특허 BM 설계
- 기술 마케팅
- 융복합 기술 발굴 플랫폼
- KAERI기업 지원 프로그램 운영

※ KAERI 중성자과학부 주도, 기술사업화팀, 기업지원팀 지원

NRRC 주요 인프라 및 장비



"실시간 중성자 멀티스케일 이차전지 분석 특화 시료환경장치 개발 및 구축"



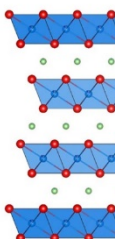
Layered Cathode Materials for Li-Ion Batteries

전자신문

2023년 10월 24일 화요일 019면 전국

metry & Temperature

Atomic

Ni migration
or Li-Ni ini

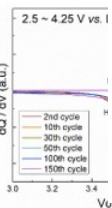
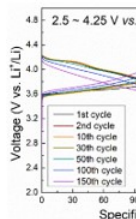
Synth

 $\text{Li}_{1-x}[\text{Ni}_x\text{Co}_{1-x}]$

Other chain

→ Void & crack

• Hig



원자력연, 차세대 이차전지 수명 연장

중성자 소각 산란·회절 장치 활용
하이니켈 합성과정 결합 정량화
최적 열처리로 수명 10% 개선

우리 연구진이 차세대 이차전지로 주목받는 '하이 니켈' 배터리 수명을 높일 새로운 방법을 찾아냈다.

한국원자력연구원 하나로양자과학 연구소는 김형섭 박사팀이 하이 니켈 양극재 합성 시 발생하는 나노 크기 결함을 정량 분석해 제어할 방법을 최초로 제시했다고 23일 밝혔다. 박혁준 한국표준과학연구원 박사, 진형민 충남대 교수팀과 함께 연구한 결과다.

하이 니켈 양극재를 사용한 것이 하이 니켈 배터리다. 하이 니켈 양극재는 값비싼 코발트 일부를 니켈로 대체하고 그 비중을 90%까지 높였다.

저렴하지만 에너지 밀도가 높아 저장 용량을 크게 늘릴 수 있다. 다만 합



한국원자력연구원 연구진과 냉중성자 연구시설. 왼쪽부터 송석현 중성자과학부 학연학생(주저자), 한영수 중성자과학부장, 김형섭 중성자과학부 선임연구원(교신저자).

성이 어렵고 입자 내부에 0.1~300나노미터(nm) 크기 미세 기공이 발생해 수명이 줄어드는 문제가 있다.

연구팀은 정확한 결합구조 분석을 위해 중성자를 활용했다. 하이 니켈 양극재 합성과정에서 열처리 조건에 따라 나노 결함이 얼마나 발생하는지

처음으로 정량화했다.

이로써 결합 최소화 최적 열처리 조건을 찾았고, 저온 전처리 공정을 거치면 부산물 형성이나 나노 크기 결합이 줄어들어 배터리 수명을 기존보다 10% 향상할 수 있음을 증명했다.

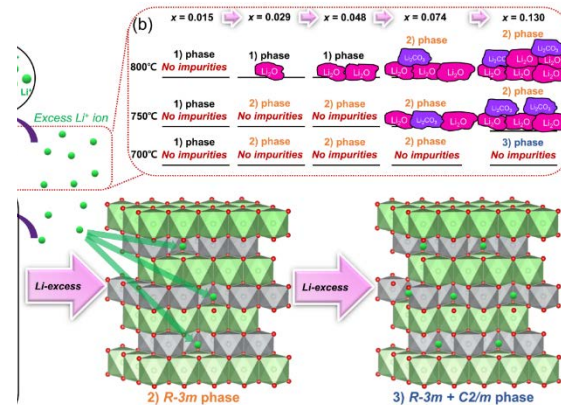
국내 유일 중성자 연구시설인 하나

로 중성자 소각 산란 및 회절 장치를 활용했다. 이 장치는 특정 물질에 충돌시켜 반사되는 중성자를 측정, 물질 성질을 분석한다. 특정 물질 원자핵과 직접 반응해 원자의 위치와 같은 미세 구조, 움직임까지 파악할 수 있다.

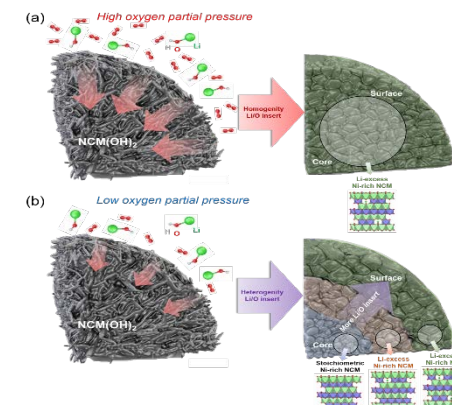
정영욱 하나로양자과학연구소장은 "기존 X선이나 전자현미경보다 중성자가 물질 특성분석에 더 탁월하다"며 "향후 다양한 양극재 개발뿐 아니라 배터리 폭발원인 분석과 같은 산업계와 과학계 핵심 난제 해결에도 폭넓게 활용될 것으로 기대된다"고 밝혔다.

해당 연구 결과는 과학기술정보통신부 방사선기술개발사업과 산업통상자원부의 저탄소 고부가 전극재제조 혁신기술개발사업 지원을 받았으며, 재료 분야 국제학술지 '어드밴스드 펄서널 머티리얼즈' 온라인판에 게재됐다.

김영준기자 kyj85@etnews.com



Chem. Eng. J. 2022, 448, 137685.

O₂ Partial Pressure

Adv. Funct. Mater. 2025, 2424823.

Adv. Energy Mater. 2020, 10, 2000521.

Adv. Funct. Mater. 2024, 34, 2306654.

Number of cycles

Recycling of Spent Cathode Materials

Practical Approaches on Recycling of Spent Cathode Materials

전자신문

2023년 10월 12일 목요일 006면 과학기술

Black powder

충청투데이

 • Recycling or Upcycling of Layered Cathodes
 2025년 2월 11일 화요일 006면 경제

원자력연, 폐배터리 리튬 회수율 97% 달성

우리 연구진이 폐배터리를 친환경적으로 재활용하는 기술을 개발했다. 높은 회수율을 자랑하고 결과물의 수명도 길다. 한국원자력연구원 김형섭·전민구·김성욱 박사팀이 전기차 폐배터리 양극 소재 업사이클링 기술을 개발했다고 11일 밝혔다. 리튬 회수율이 97%에 달하며, 재활용 양극 소재 수명은 30% 이상 길다. 또 기존 재활용 공정보다 친환경적이다.

염소가스로 LiCl-잔여 블랙파우더 분리 기존 공정처럼 폐수·대기오염 발생 없어 재활용 양극소재 수명도 30% 이상 향상

양극 소재 업사이클링은 다 쓴 폐배터리 양극을 회수하거나 성능을 올려 재활용하는 것이다. 전기차 배터리는 리튬이온전지를 활용하는데 양극 소재가 배터리 전체 단가 40% 이상을 차지해 양극 소재 내 리튬·니켈·코발트 등 금속을 회수하는 것이 폐배터리 재활용 주목적이다.

기존 재활용 공정에서는 폐배터리 양극 소재를 분쇄해 블랙파우더로 만든다. 이후 블랙파우더를 화학용액으로 녹이는 습식 처리나 900도 고열 건식 처리후 남은 금속 원소를 회수한다. 하지만 습식 공정은 고독성 폐수를, 건식 공정은 대기오염을 발생시킨다.



전기차 폐배터리 양극 소재 업사이클링 기술을 개발한 한국원자력연구원 연구진. 왼쪽부터 전민구 박사, 김형섭 박사(교신저자), 김경선(제1저자) 학연학생, 김성욱 박사.

원자력연은 블랙파우더에 염소가스를 주입해 염화리튬(LiCl)과 잔여 블랙파우더로 분리했다. 염화리튬은 물에 잘 녹아 리튬 회수가 쉽고 회수율은 97%에 달했다.

연구진은 또 배터리 성능도 유지했다. 배터리 성능은 양극 소재 내 리튬이 얼마나 정량 합성됐는지에 따라 좌우되는데 블랙파우더에 추가로 리튬과 니켈을 투입, 고온 합성해 양극 소재 내 니켈 함량을 늘리고 리튬을 양극 소재에 균일 분포시키는 데 성공했다. 이렇게 업사이클링한 양극 소재는 기존 양극 소재보다 30% 이상 수명이 긴 것으로 확인됐다.

김영준기자 kyj85@etnews.com

전기차 배터리 신흥강자 LFP 경제적 재활용 공정 개발

세계 전기차 배터리 시장에서 40% 점유율을 차지하고 있는 리튬인산철(LiFePO₄, 이하 LFP) 배터리의 약점으로 꼽히던 재활용 문제를 국내 연구진이 극복하는 데 성공했다.

10일 한국원자력연구원에 따르면 김형섭 중성자과학부 박사 연구팀이 염소(Cl₂) 기체를 활용해 LFP 배터리의 양극 소재를 경제적이고 친환경적으로 추출, 재활용하는 공정을 개발했다.

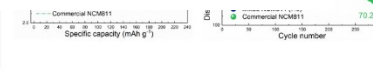
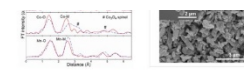
LFP 배터리는 양극재로 리튬인산철(LiFePO₄), 음극재로 흑연 등을 사용한다. 기존 리튬이온 배터리와 양극재만 다른데, 리튬인산철의 화학적 특성상 산소 배출이 억제돼 화재와 폭발 위험이 적어 최근 전기차 배터리로 주목받고 있다.

하지만 LFP는 기존의 배터리 재활용 방식인 산성 용액으로 처리하면 높은 비용 대비 회수할 수 있는 원료(Li)밖에 없어 경제성이 떨어진다. 다량의 폐산성 용액이 발생하는 것도 문제다.

원자력연 연구팀은 LFP 폐배터리를 분해할 때 나오는 분말 형태의 양극 소재를 염소 기체와 200도에서 10분간 반응시키는 방법으로 LFP의 단점을 보완하는 데 성공했다.

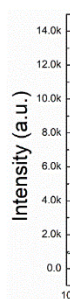
이를 통해 추출된 염화리튬(LiCl)은 상용화된 기존 변환 공정을 통해 탄산리튬(Li₂CO₃)이나 수산화리튬(LiOH)으로 전환해 새 LFP 배터리의 양극재 합성 원료로 다시 사용할 수 있다.

김종곤 기자 kgonny@cctoday.co.kr



Garnet-Type Solid-State Electrolytes

Synthesis and Structure



- ✓ Phase purity (Precursor stoichiometry, Syn. Temp., Heating/Aging/Cooling, Grinding, Sieving, Atmosphere, Crucible)



- ✓ Pellet purity and density (Inhomogeneity, Impurity, Crystallinity, void, cracks → Ionic conductivity)
- ✓ Polishing & Other treatment

<http://www.material-sys.com/global/content11/>

전자신문

원자력연, 전고체 배터리 쇼트 원인 밝혀

2024년 10월 17일 목요일 009면 과학기술

<전기적 단락>

결정구조 변화 유발 조건 알아내 안정적 제어 개선 공정까지 개발

전기차 배터리 안전성 문제가 대두되는 가운데, 꿈의 배터리인 '전고체 배터리'의 전기적 단락(쇼트) 원인을 찾아냈다.

한국원자력연구원은 김형섭 박사팀이 세계 최초로 전고체 배터리 전해질 결정구조 변화 원인을 규명하고 제어 방법을 제시했다고 16일 밝혔다.

전고체 배터리는 액체 대신 고체를 전해질로 사용해 안전성이 보장된 차세대 배터리이지만 전해질 결정구조가 변하면 순간적으로 많은 전류가 흘러 쇼트가 발생하고 폭발을 일으킬 수 있다. 고체전해질 결정구조 변화 원인으로서는 리튬 양과 전해질 표면 연마 정도가 영향을 미치는 것으로 추정되나, 그 상관관계나 개선 방법은 알려져 있지 않았다.

연구팀은 중성자 빔으로 고체전해질 결정구조 내부 리튬 양을 정량화했다. 그리고 X-선으로 고체전해질 표면 연마 정도에 따른 결정구조 변화량도 정량화했다.

이 과정에서 고체전해질 합성에 사용한 리튬 양과 연마 정도에 따라 고체전해질 표면 결정구조 일부가 정육



홍석재 연구원이 고체전해질 표면구조 분석 실험을 하고 있다.

면체(입방정계)에서 직육면체(정방정계) 구조로 변화하는 현상을 발견했다. 복합적인 변수를 제어해 결정구조 변화 유발 조건을 알아낸 것은 세계 최초다.

결정구조가 직육면체로 변한 고체전해질은 이온 전도성이 낮아 음극·양극과의 저항을 증가시켜 원활한 리튬 이온 이동을 방해하고 쇼트를 초래하는 것도 확인했다.

이에 더해 고체전해질 제조 단계에서 쇼트를 예방할 수 있는 개선 공정을 개발했다. 전해질 표면 연마 과정에서 연마제 회전 속도를 특정 정도로 획기적으로 낮추면 결정구조가 안

정적으로 제어돼 이상 변화가 일어나지 않는 것을 확인했다.

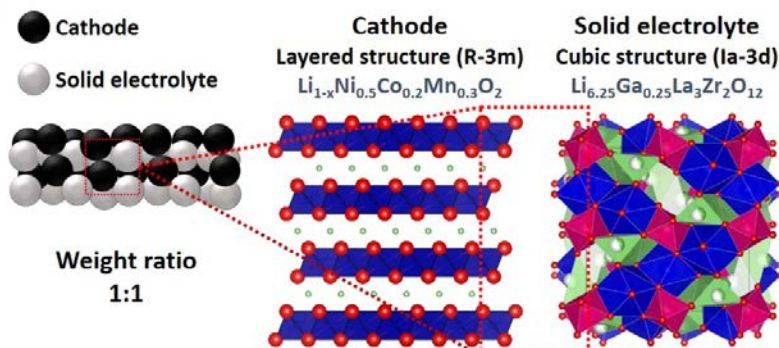
김형섭 박사는 "전고체 배터리 쇼트 원인 규명과 제어 기술 구현은 배터리 화재·폭발 방지를 위한 가이드 라인을 제시해 줄 것"이라고 밝혔다.

이번 연구는 과학기술정보통신부 과학기술사업화진흥원 학연협력플랫폼 구축 시범사업 지원을 받았으며 결과는 어드밴스드 에너지 마テリア얼즈에 9월 온라인으로 공개됐다. 연구에는 정성균 울산과학기술원(UNIST) 교수팀, 유승호 고려대 교수팀, 이동주 충북대 교수팀도 참여했다.

김영준기자 kyj85@etnews.com

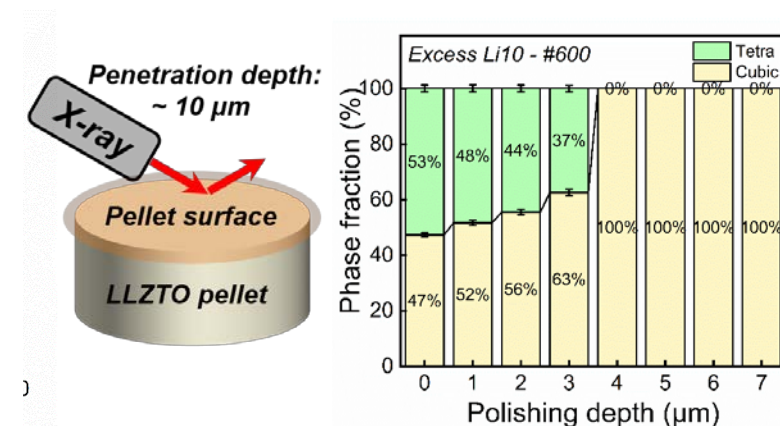
X-ray scattering

Structural Evolution during Co-Sintering



S. Hong et al *Small*, 2021, 17, 2103306.

Structures of cubic-garnet solid electrolytes



al. *Adv. Energy. Mater.* 2025, 15, 2402666.

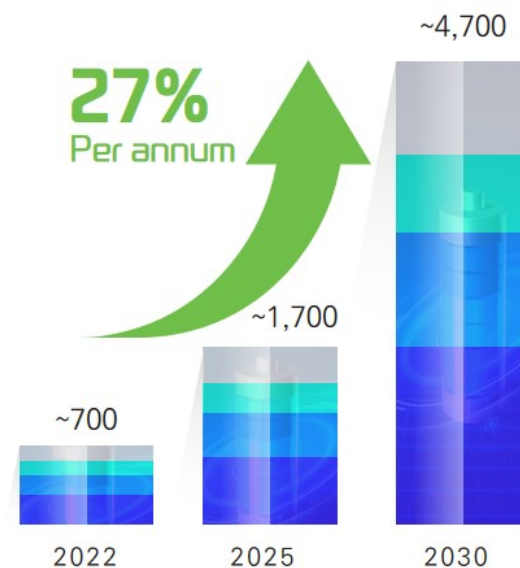
Growth of the Global Battery Market



<https://newsroom.posco.com/kr/2차전지의-필수품-리튬-왜-중요할까/>

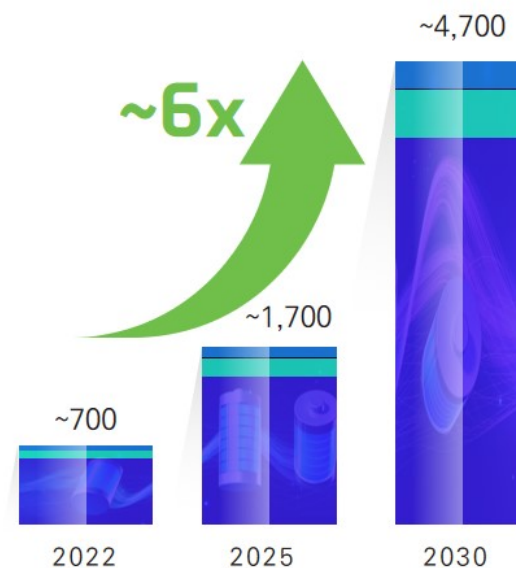
By region [단위: GWh]

■ 그 외 국가들 ■ 미국 ■ 유럽 ■ 중국



By sector [단위: GWh]

■ 가전제품 ■ 고정저장소 ■ 모빌리티



McKinsey & Company (2023)

Li-ion Batteries for Electric Vehicles (EVs)



2014년, 27 kWh, 1회 충전 148 km
4천만원대

전자신문, " 제주도 전기차 보급 시범사업 '소울 EV'" 2014-03-29.

테슬라 모델3

중형 세단 | 2022

전체

기본정보 | 제원 | 오너평가 | 포토 | 판매량 | 모의견적 | 모델비교 | 함께 >



기본정보

가격 7,034~9,417만원 내자시세

연료 전기

주행 403~480km 1회 충전 시

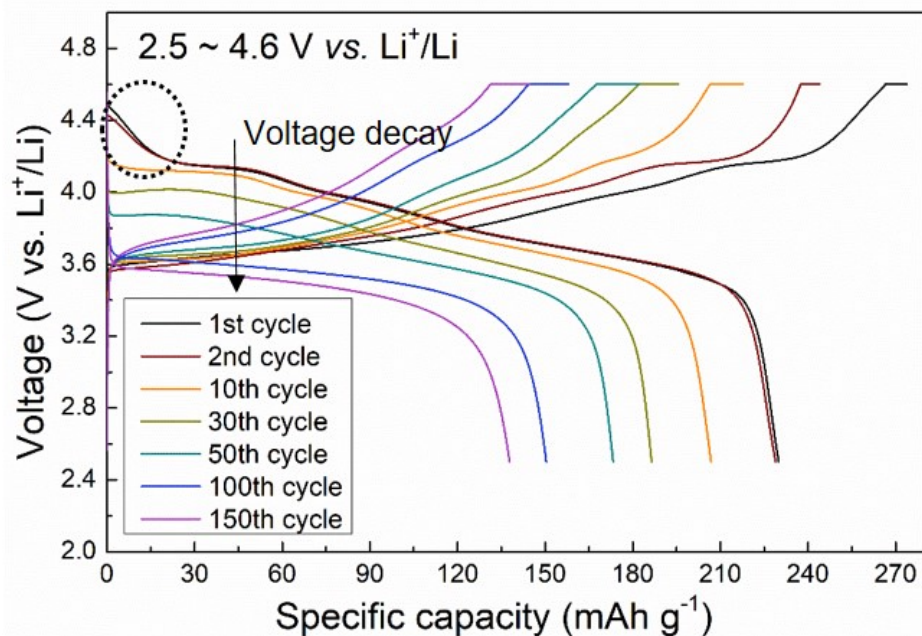
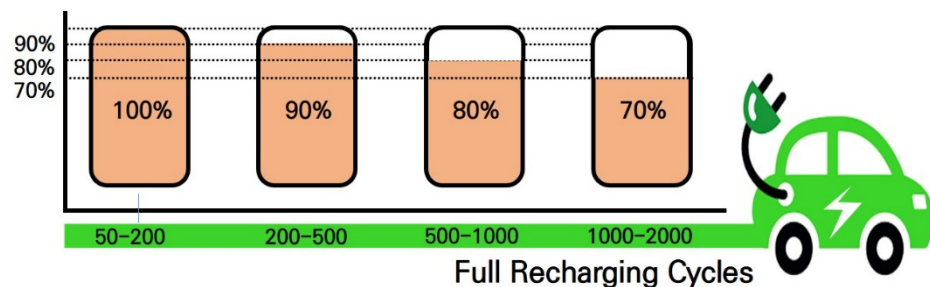
연비 복합 5.1~5.7km/kWh 도심 4.8, 고속 4.5

출력 208~360kW 모터 279~482hp (단순환산치)

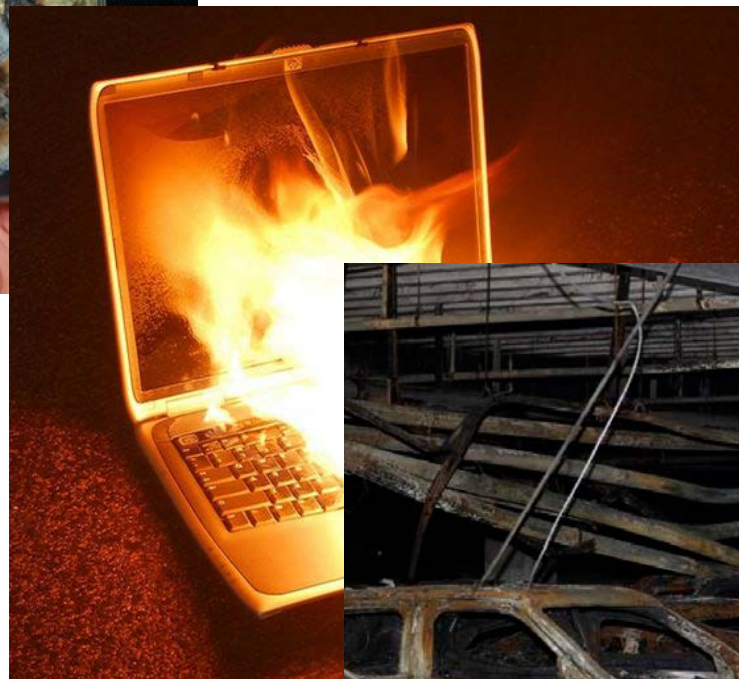
용량 50~75kWh 배터리

네이버 검색: 테슬라 모델3

Battery Cell/Pack degradation & Safety



S. H. Song et al. Adv. Energy. Mater. 2020, 10, 2000521.

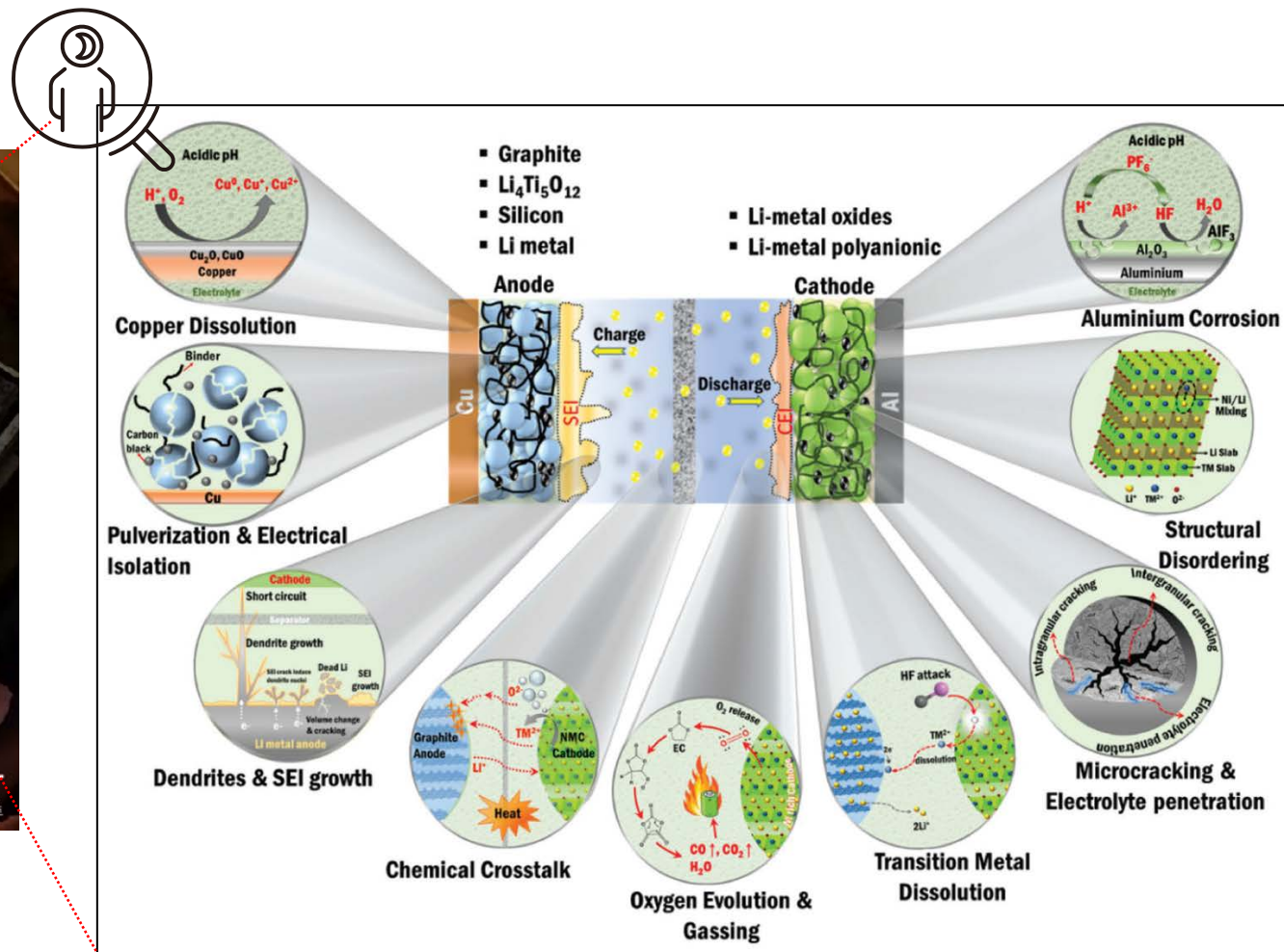


<http://it.chosun.com/news/article.html?no=2823515>; <https://www.survivalkit.com/blog/how-to-deal-with-lithium-ion-battery-fires/>; ;
NEWSIS '청라 전기차 화재' 4개월 전 이미 지하주차장 위험 우려, 2024.08.21

Degradation Mechanism in Li-ion Batteries



InsideEVs EVPOST “배터리 품팩터 전쟁: 왜 테슬라만 원통형 배터리를 쓰나?” 2022. 09.15



R. Narayan et al. *Adv. Energy Mater.* **2022**, 12, 2102652.

Characterization of Battery Materials & Cells

이차전지 소재/셀 평가 기술의 종류

전기화학 분석 기술

- Open Circuit Voltage (OCV), Galvanostatic tests, Linear Sweep Voltammetry (LSV), Cyclic Voltammetry (CV), Potential Stepping Test, Galvanostatic Intermittent Titration Technique (GITT), Potentiostatic Intermittent Titration Techniques (PITT), Electrochemical Impedance Spectroscopy (EIS), etc.

X-선 활용 분석 기술

- X-ray diffraction (XRD), Soft- and hard-X-ray absorption spectroscopy (XANES, EXAFS, RIXS), X-ray imaging (XRI)
- TXM, STXM, CXDI, XPDF, XRF, XPS, SAXS, etc.

전자빔 활용 분석 기술

- Scanning electron microscopy (SEM) / EDS, FIB, etc.
- Transmission electron microscopy (TEM) / EELS, cryo-TEM, STEM, LAADF, EDS, etc.

중성자 활용 분석 기술

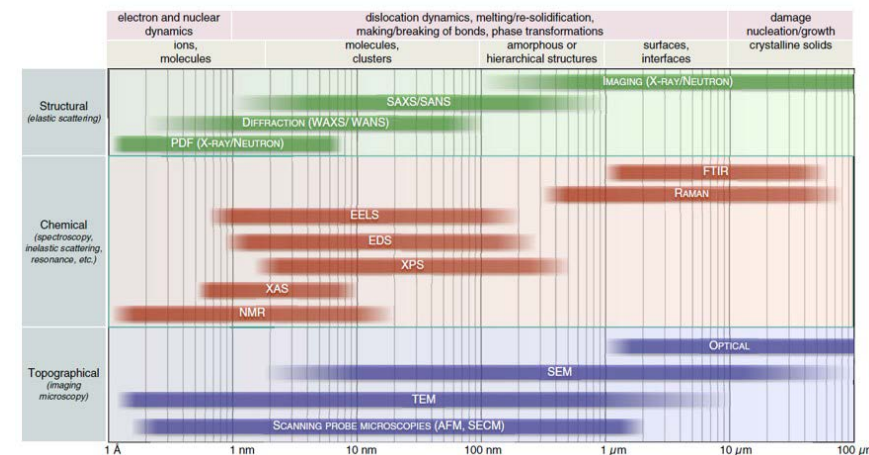
- Neutron powder diffraction (NPD), Neutron Depth Profiling (NDP), Neutron imaging (NI)
- Neutron Reflectivity, SANS, etc.

광학 활용 분석 기술

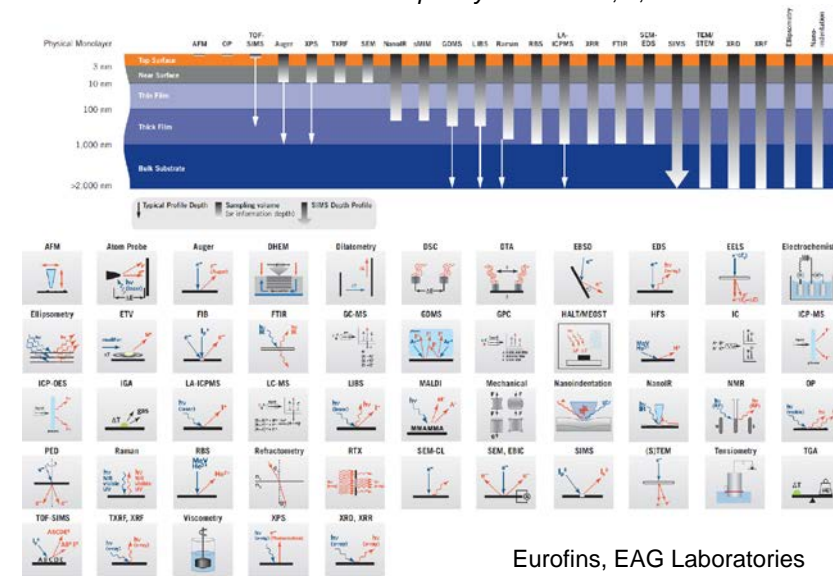
- Optical microscopy (OM), Raman, Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy

기타 중요 분석 기술

- Nuclear magnetic resonance (NMR), Atomic force microscopy (AFM), Scanning electrochemical microscopy (SECM)
- MRI, EPR, TGA-DSC, BET, ICP, TOF-SIMS, AES, etc.

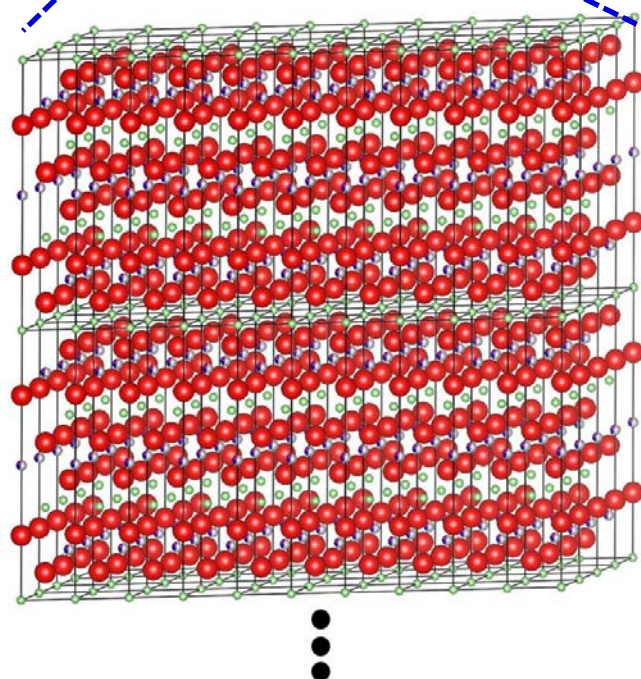


G. Gourdin et al. *Cell Rep. Phys. Sci.* **2021**, 2, 100660.

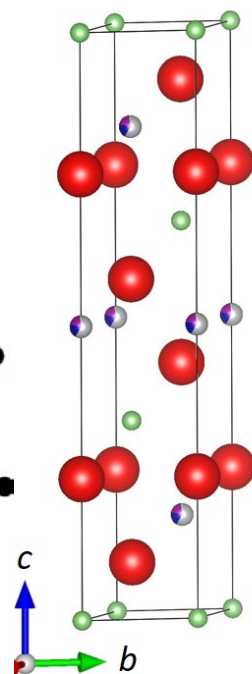


Euofins, EAG Laboratories

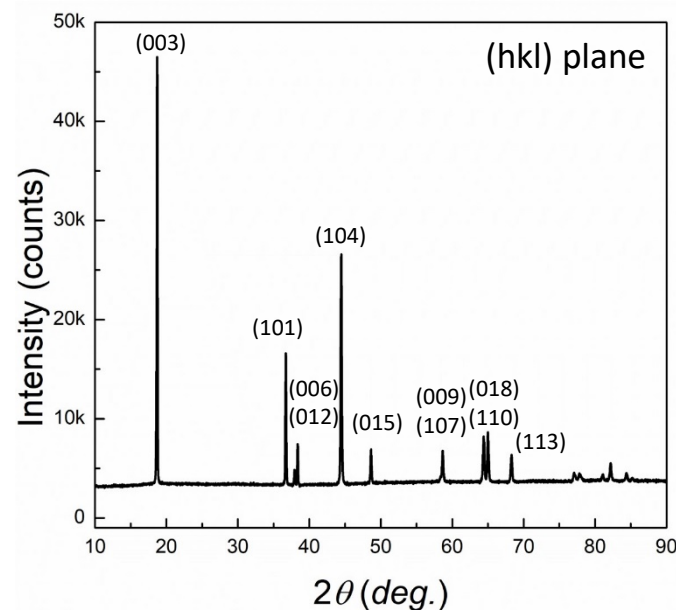
Diffraction for Battery Materials



Unit cell



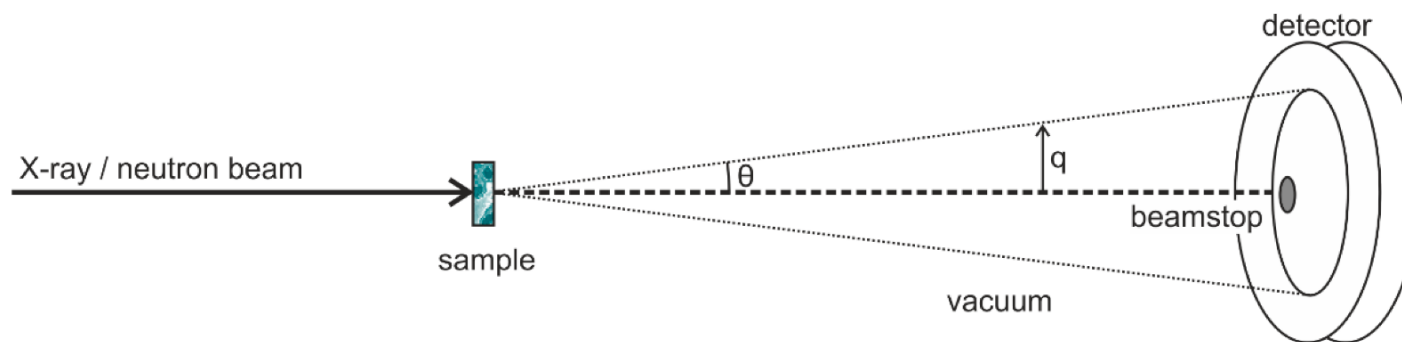
Diffraction patterns



결정구조 정보
Structural information

- Phase index
- Crystal system & Space group
- Lattice parameters
- Quantitative analysis of composites
- Atomic position (x, y, z)
- Atomic thermal motion
- Atomic occupancy in the lattice
- Phase transition at various conditions
- Particle size & strain
- Ionic conduction path
- Valence state
- Magnetic structure
- Preferred orientation / texture
- Stacking fault

Neutron Diffraction for Battery Materials

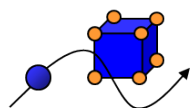


	Mass	No Charge	Spin 1/2 ↑
--	------	-----------	------------

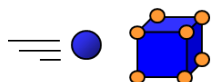


No charge

→ Deep penetration

Wavelength Å ~ nm
(Thermal & Cold Neutron)

→ Atomic & Nanometer scale

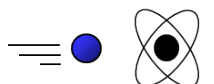


Energy ~ meV

→ Same magnitude as
basic excitations in solids

Spin = 1/2

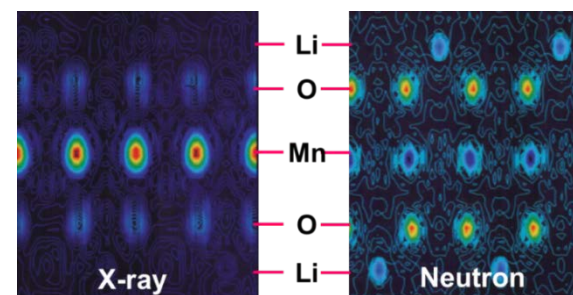
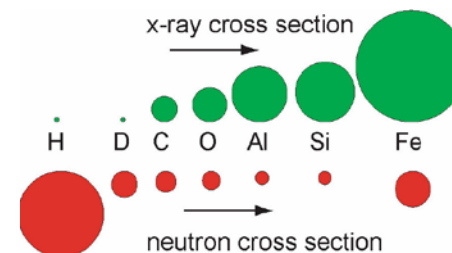
→ Magnetic structure, dynamics



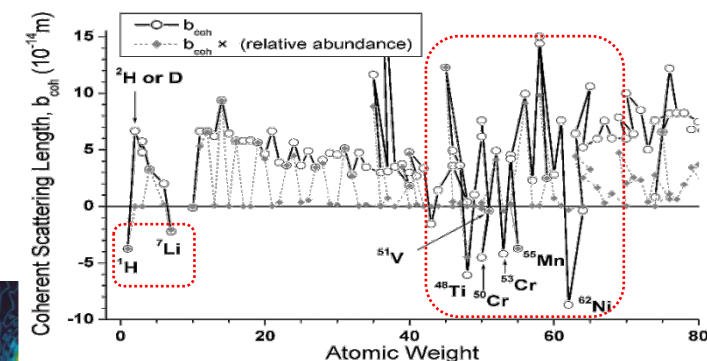
Interacts with nuclei

→ Contrast variation
($b_H = -3.74\text{fm}$, $b_D = 6.67\text{fm}$)

Analysis of light elements (Li, O, C, F, etc.)



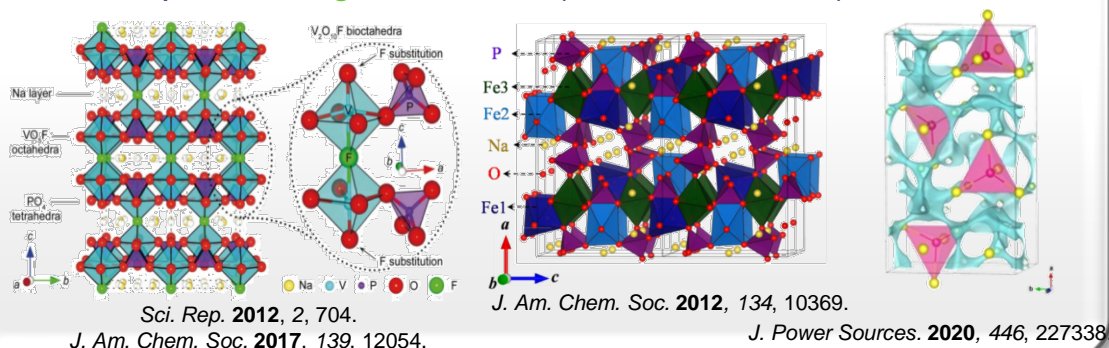
Neighbor atoms in periodic table (Mn, Fe, Co, Ni, etc.)



Neutron Diffraction for Battery Materials

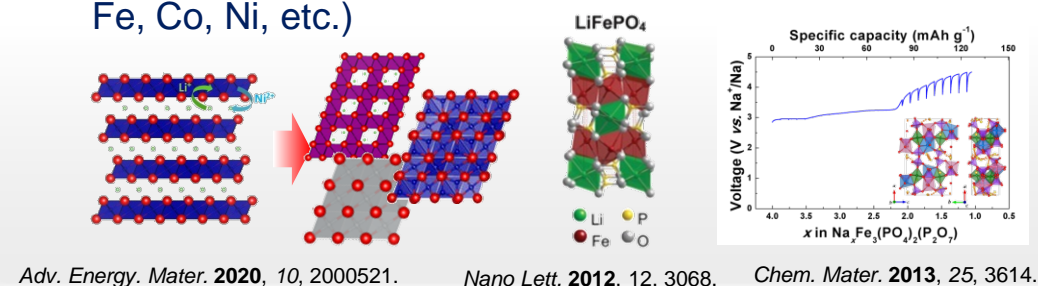
New electrode/electrolyte materials

- Structure characterization of battery materials composed of **light elements** (Li, Na, O, P, etc.)



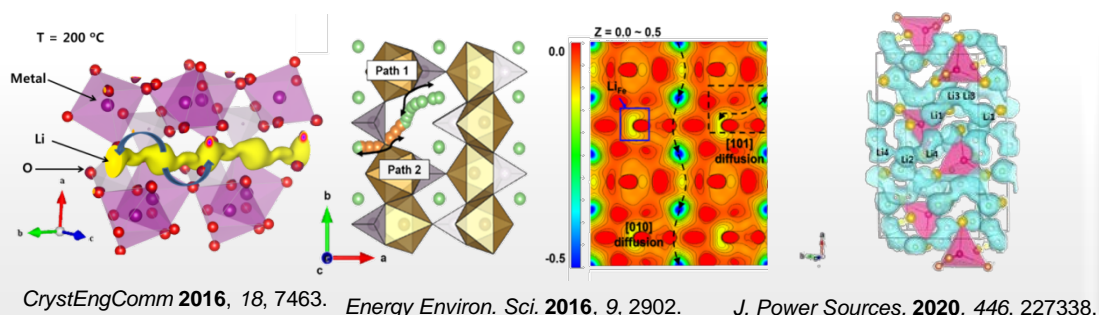
Crystal structure change

- Li-TM disorders** (intermixing) in crystal structure of electrode materials
- Characterization of **neighbor atoms in periodic table** (Mn, Fe, Co, Ni, etc.)



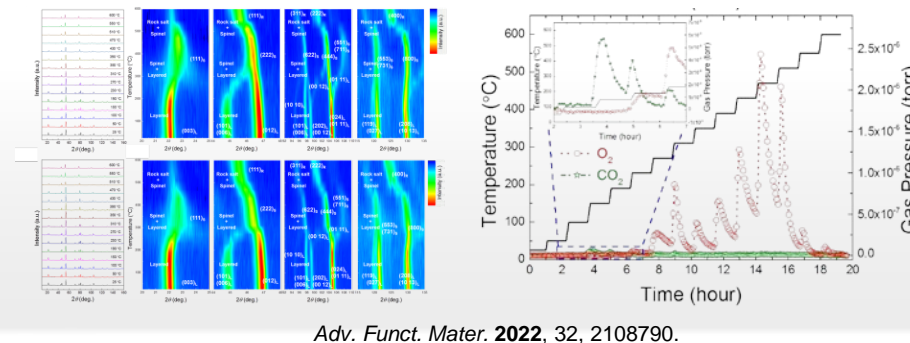
Visualization of Li diffusion motions

- Li diffusion path** in crystal structure of electrode materials by Maximum entropy method (**MEM**)

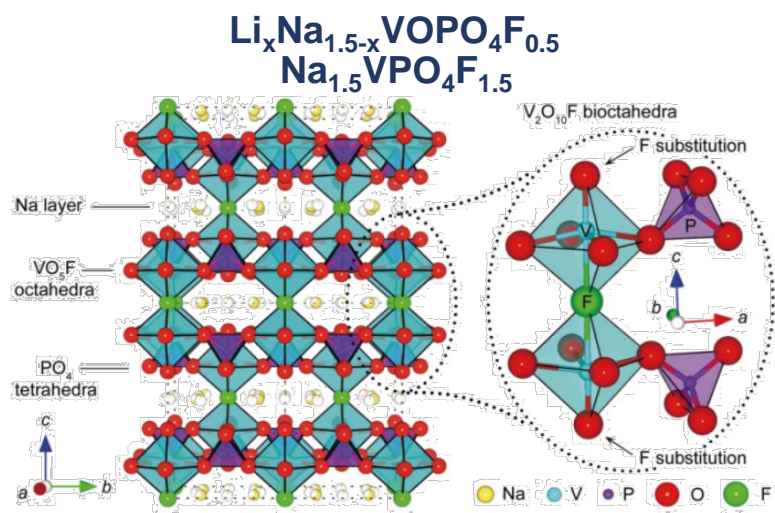


In-situ neutron diffraction techniques

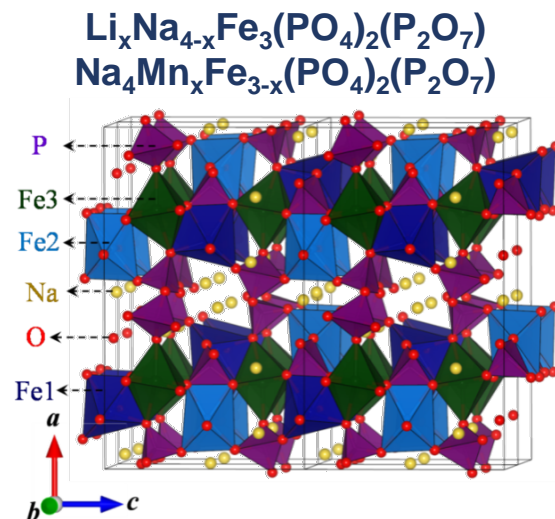
- In situ** characterization of crystal structure at various conditions (high/low T, ch/dis, pressure)



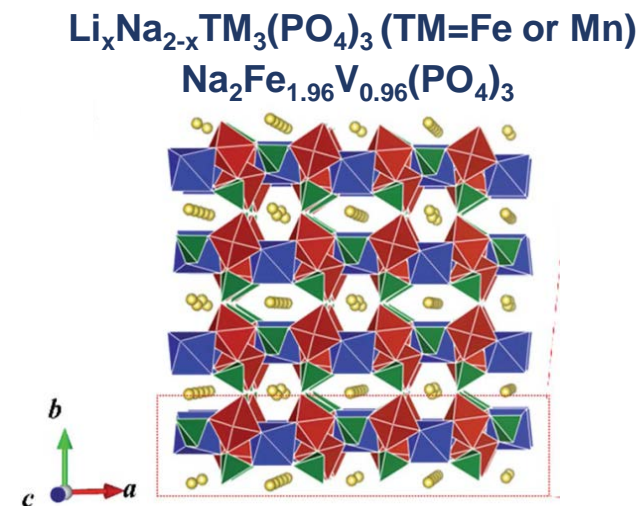
New Electrode Materials for Li/Na-ion Batteries



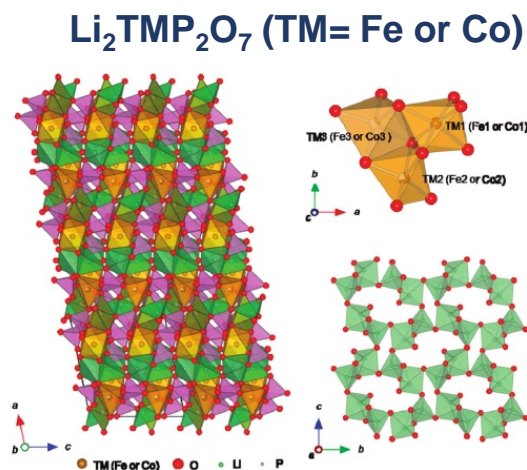
R. Shakoor et al., *J. Mater. Chem.* **2012**, 22, 20535.
Y. -U. Park et al., *Sci. Rep.* **2012**, 2, 704.
Y. -U. Park et al., *Adv. Funct. Mater.* **2014**, 24, 4603.
Y. -U. Park et al., *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, 139, 12054.



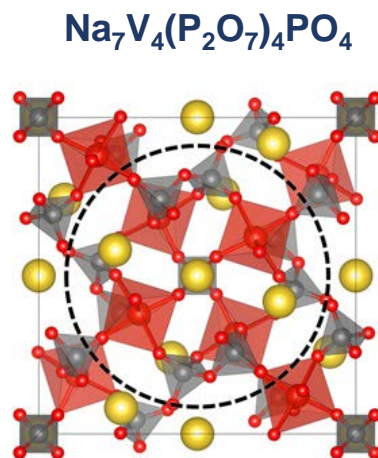
H. Kim et al., *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, 134, 10369.
H. Kim et al. *Chem. Mater.* **2013**, 25, 3614.
H. Kim et al. *Energy Environ. Sci.* **2015**, 8, 3325.
H. Kim et al. *Chem. Mater.* **2016**, 28, 7241.



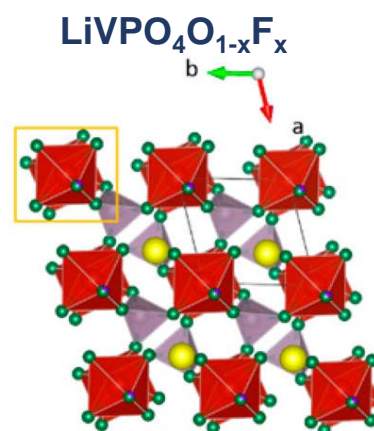
J. Kim et al., *Energy Environ. Sci.* **2013**, 6, 830.
J. Kim et al., *J. Mater. Chem. A* **2014**, 2, 8632.
J. Kim et al., *J. Mater. Chem. A* **2017**, 5, 22334.



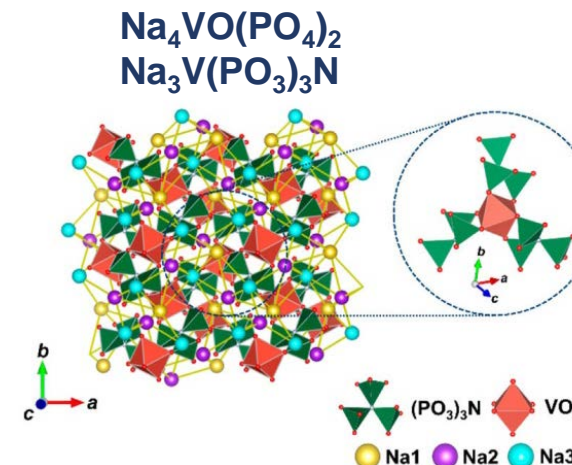
H. Kim et al., *Chem. Mater.* **2011**, 23, 3930.



S. Y. Lim et al. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **2014**, 111, 599.



M. Kim et al., *Adv. Sci.* **2016**, 3, 1500366.
M. Kim et al., *Chem. Mater.* **2017**, 29, 4690.



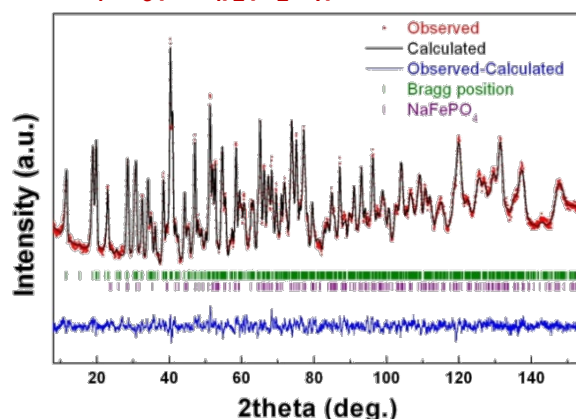
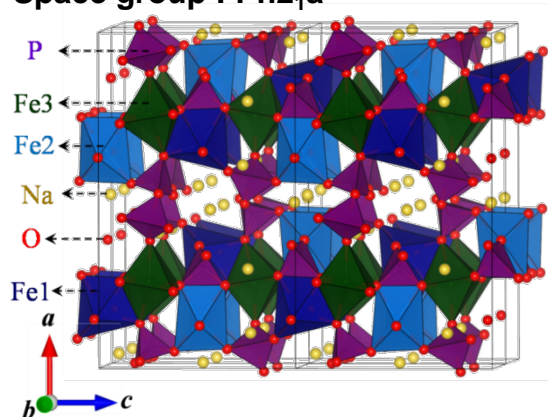
J. Kim et al., *Chem. Mater.* **2017**, 29, 3363.
J. Kim et al., *Chem. Mater.* **2017**, 29, 7826.

New Electrode Materials for Li/Na-ion Batteries

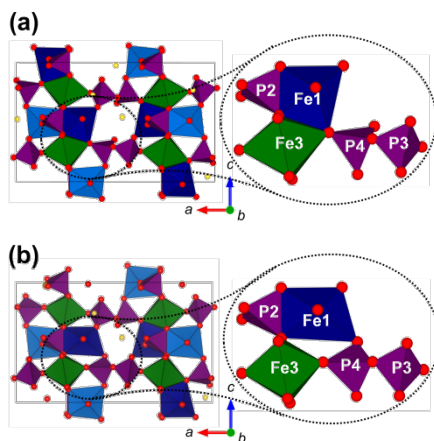
❖ Structural analysis of new mixed-phosphate compounds (NFPP)

Crystal system : orthorhombic

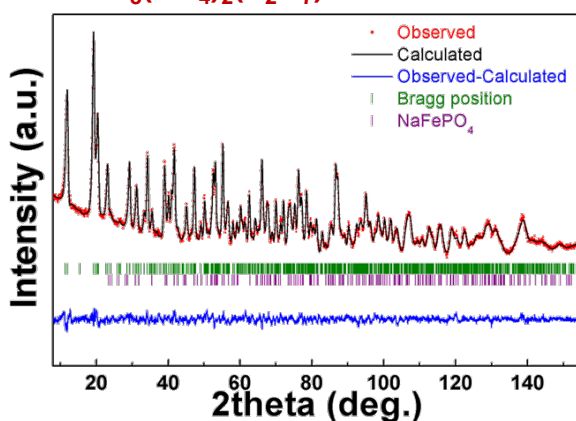
Space group : Pn2₁a



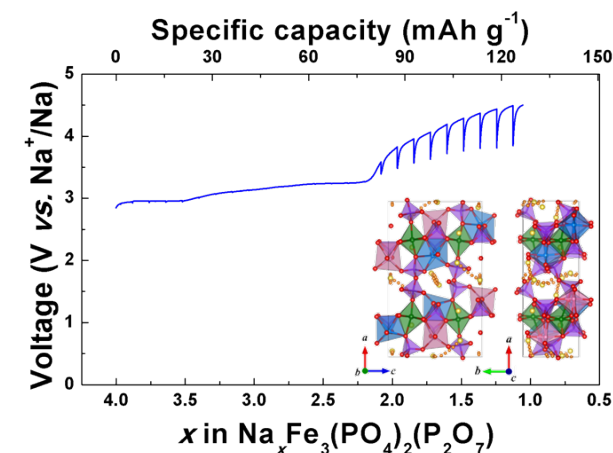
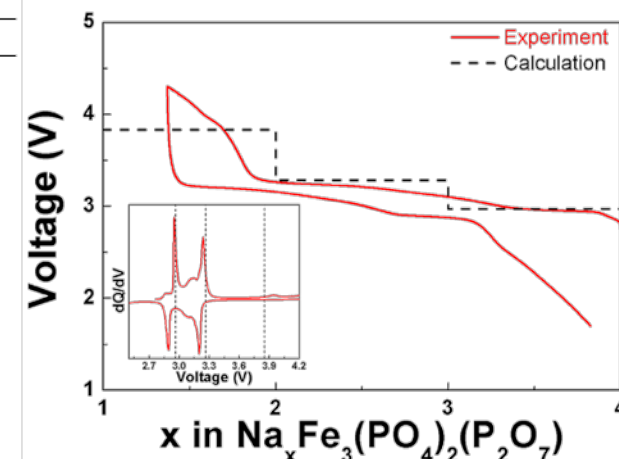
First principles calculations



Neutron diffraction

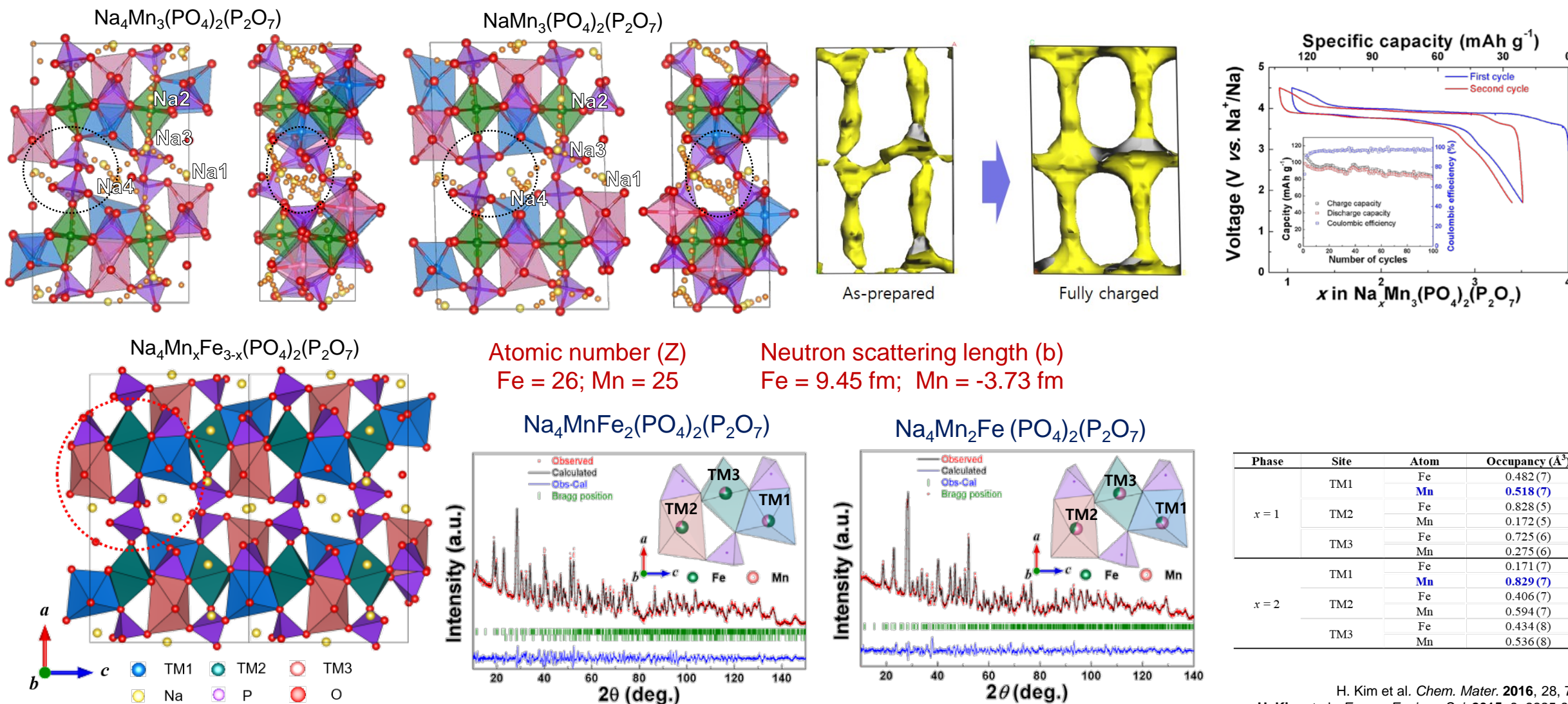


Atom	x	y	z	Biso
Fe1	0.3377(3)	0.138(3)	0.5042(9)	0.03(7)
Fe2	0.1402(3)	0.624(3)	0.4886(8)	0.03(7)
Fe3	0.2440(5)	0.358(4)	0.7469(11)	0.03(7)
P1	0.2950(6)	0.618(4)	0.502(2)	0.13(10)
P2	0.1772(5)	0.123(5)	0.4918(19)	0.13(10)
P3	0.5630(6)	0.488(4)	0.7382(14)	0.13(10)
P4	0.4446(7)	0.173(4)	0.7323(12)	0.13(10)
Na1	0.4923(13)	0.822(4)	0.984(2)	1.1(2)
Na2	0.2941(9)	0.868(4)	0.750(3)	1.1(2)
Na3	0.3949(11)	0.459(4)	0.2686(20)	1.1(2)
Na4	0.4681(12)	0.695(2)	0.5473(19)	1.1(2)
O1	0.2417(8)	0.590(3)	0.6136(16)	0.29(5)
O2	0.3563(8)	0.439(4)	0.4731(14)	0.29(5)
O3	0.3335(6)	0.814(4)	0.5351(12)	0.29(5)
O4	0.2414(7)	0.649(4)	0.3874(13)	0.29(5)
O5	0.2355(7)	0.138(4)	0.6097(12)	0.29(5)
O6	0.1258(7)	-0.071(4)	0.5074(13)	0.29(5)
O7	0.2299(7)	0.086(4)	0.3848(15)	0.29(5)
O8	0.1352(7)	0.302(4)	0.4674(12)	0.29(5)
O9	0.4819(7)	0.401(4)	0.7019(10)	0.29(5)
O10	0.5510(7)	0.595(4)	0.8760(12)	0.29(5)
O11	0.6225(6)	0.326(3)	0.7502(18)	0.29(5)
O12	0.5816(5)	0.634(4)	0.6339(12)	0.29(5)
O13	0.4558(6)	0.123(4)	0.8585(13)	0.29(5)
O14	0.3709(7)	0.191(4)	0.6882(12)	0.29(5)
O15	0.4915(7)	0.026(3)	0.6515(10)	0.29(5)



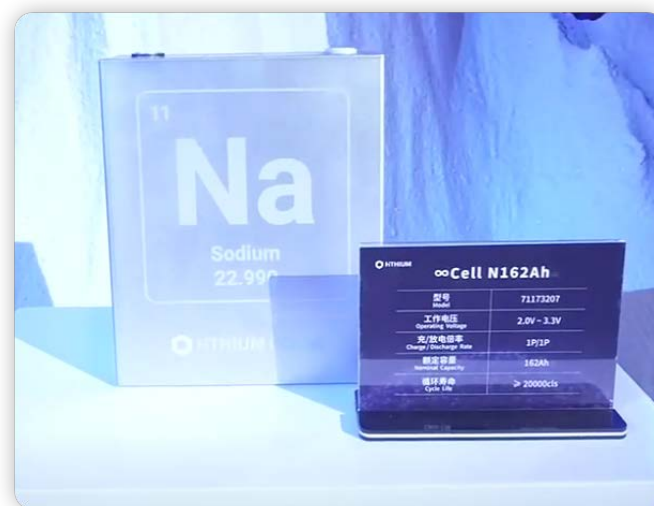
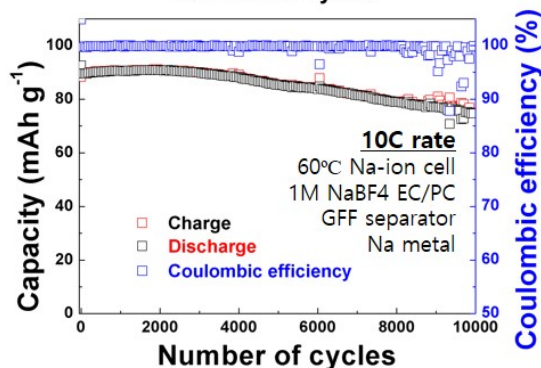
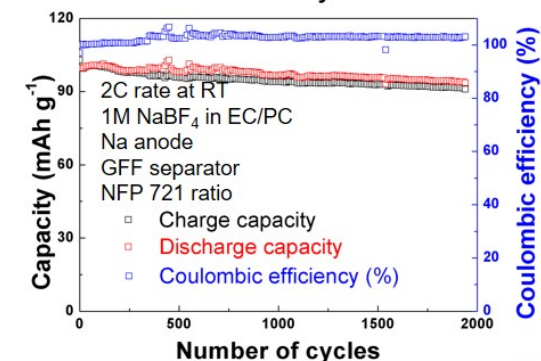
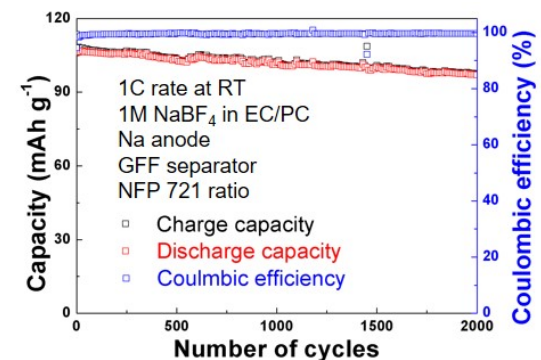
H. Kim et al., *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, 134, 10369.
H. Kim et al. *Chem. Mater.* **2013**, 25, 3614.

New Electrode Materials for Li/Na-ion Batteries



H. Kim et al. *Chem. Mater.* **2016**, 28, 7241
 H. Kim et al., *Energy Environ. Sci.* **2015**, 8, 3325-3335.

New Electrode Materials for Li/Na-ion Batteries



+86 021 5155-0306

SMM

Shanghai Metal Market

Index

Markets

News+Insights

Price Center

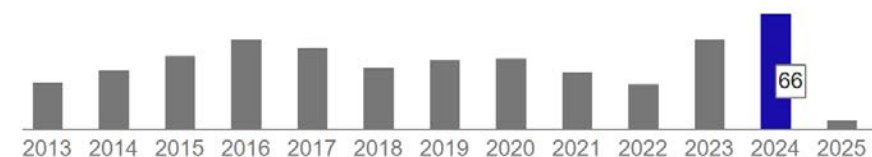
[Home](#) > [News](#) > [SMM Sodium Battery Analysis] 100,000 mt Sodium Battery Cathode NFPP Project Put Into Operation in Z...

[SMM Sodium Battery Analysis] 100,000 mt Sodium Battery Cathode NFPP Project Put Into Operation in Zigong High-Tech Zone; Jiana First Achieves Large-Scale NFPP Production Line of 10,000 mt

Dec 19, 2024, at 10:45 am

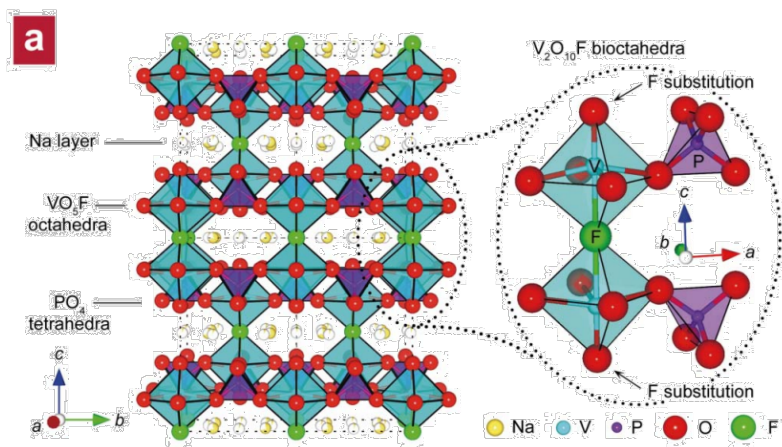
[SMM Sodium Battery Analysis: 100,000 mt Sodium Battery Cathode NFPP Project Put into Operation in Zigong High-Tech Zone; Gana First Achieves Large-Scale NFPP Production Line of 10,000 mt Capacity] On December 18, 2024, Gana's annual 100,000 mt polyanion sodium battery cathode active material project in Zigong High-Tech Zone was officially put into operation.

전체 인용횟수 495회 인용



New Electrode Materials for Li/Na-ion Batteries

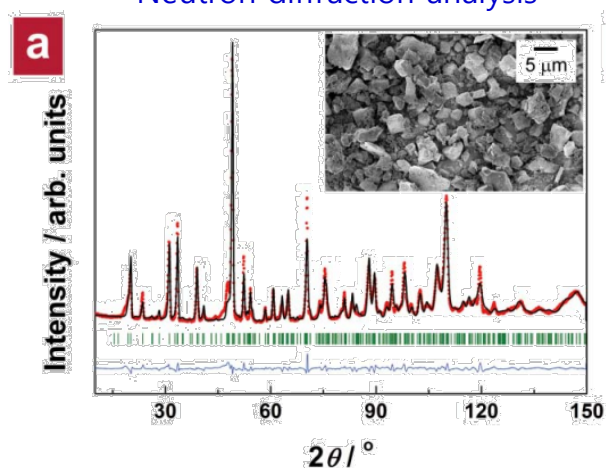
❖ Li-V-based compound analysis (NASICON, $\text{Li}_{1.1}\text{Na}_{0.4}\text{VPO}_{4.8}\text{F}_{0.7}$)



Vanadium is invisible from neutron diffraction

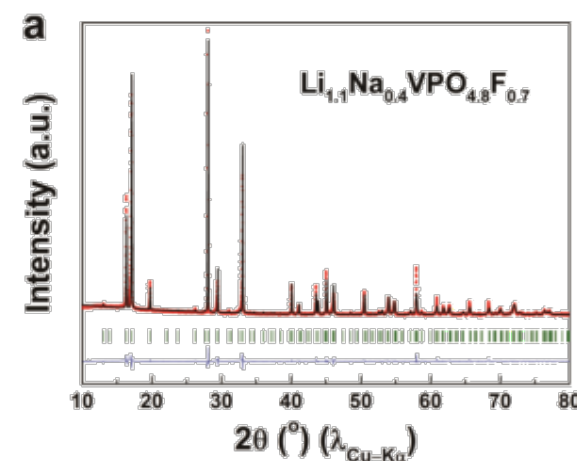
Lithium is invisible from X-ray diffraction

Neutron diffraction analysis



R. Shakoor et al., *J. Mater. Chem.* **2012**, 22, 20535.
Y. -U. Park et al., *Sci. Rep.* **2012**, 2, 704.

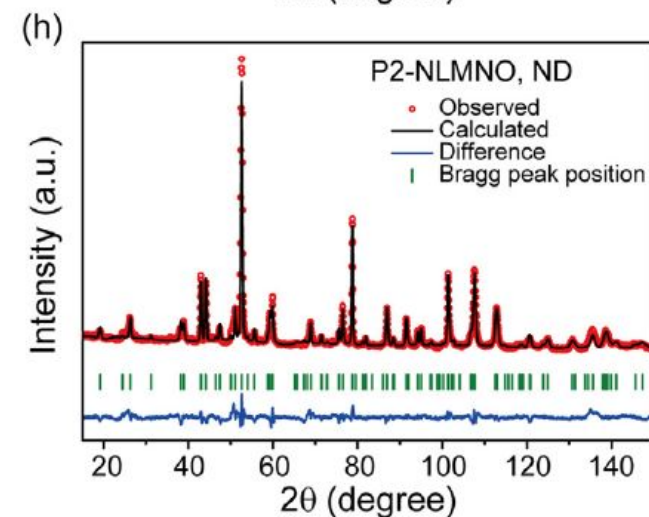
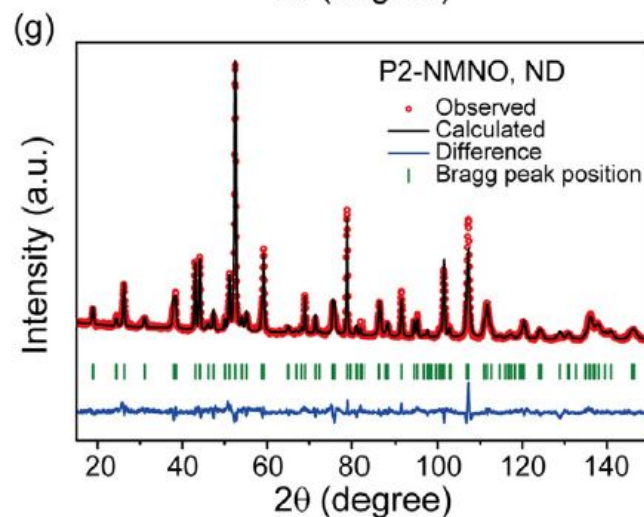
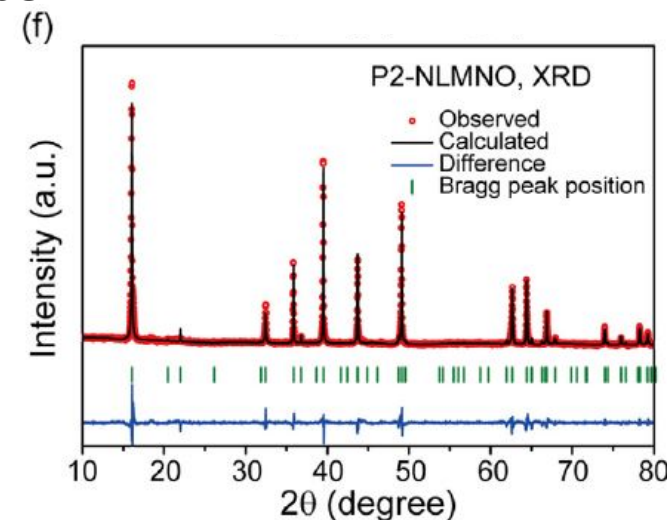
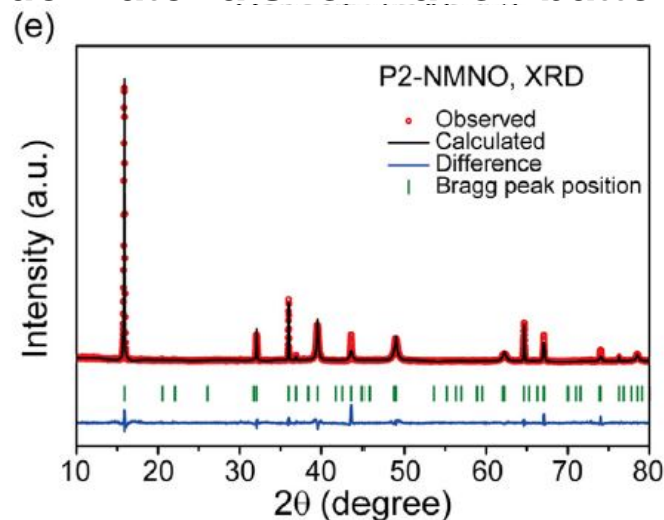
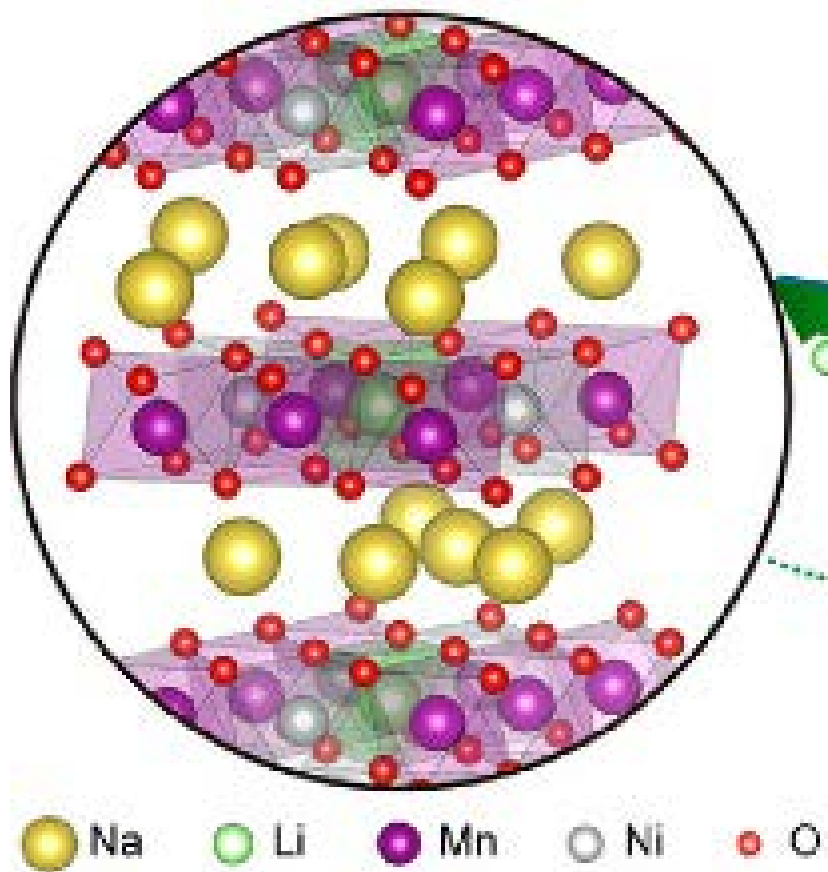
X-ray diffraction analysis



Y. -U. Park et al., *Adv. Funct. Mater.* **2014**, 24, 4603.

New Electrode Materials for Li/Na-ion Batteries

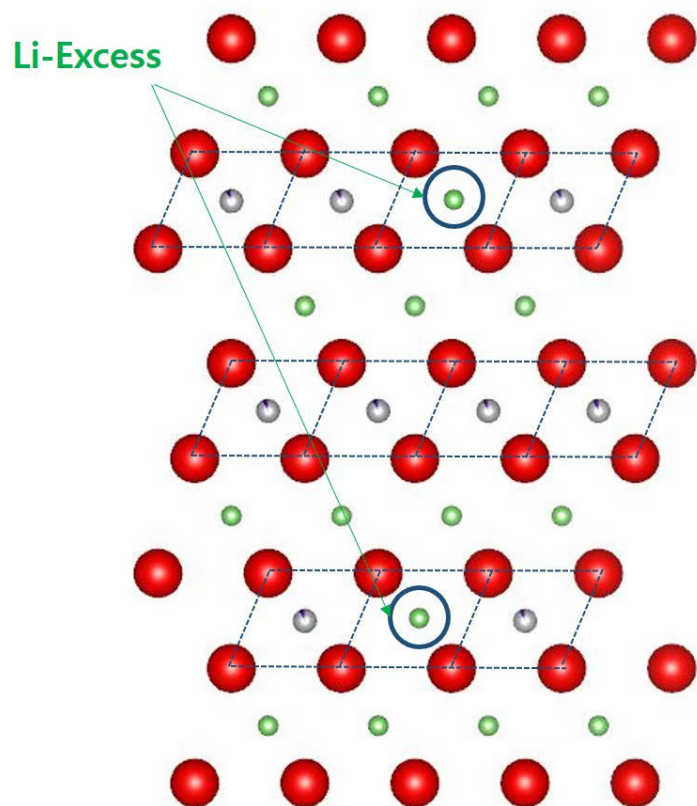
❖ Ni-Mn ordering in P2-type Layered cathode materials for Na-ion batteries



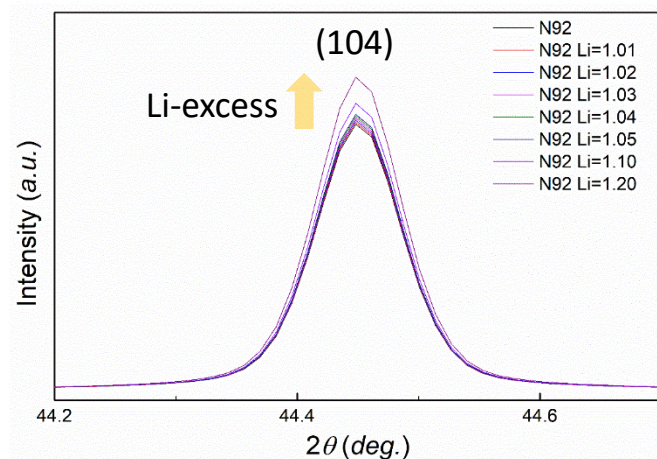
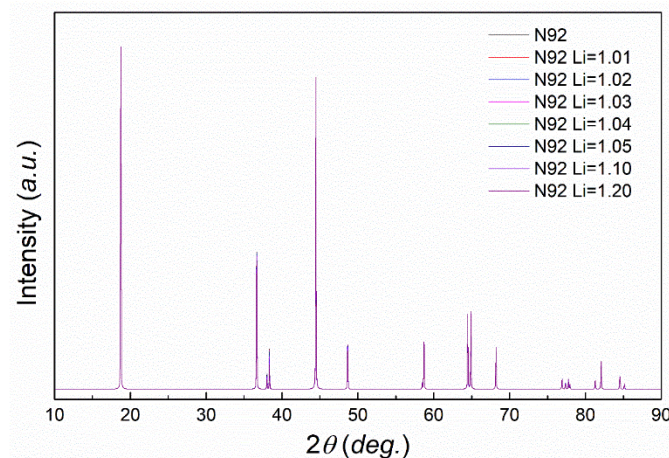
New Electrode Materials for Li/Na-ion Batteries

❖ Li in the lattice of Ni-rich NCM cathode materials

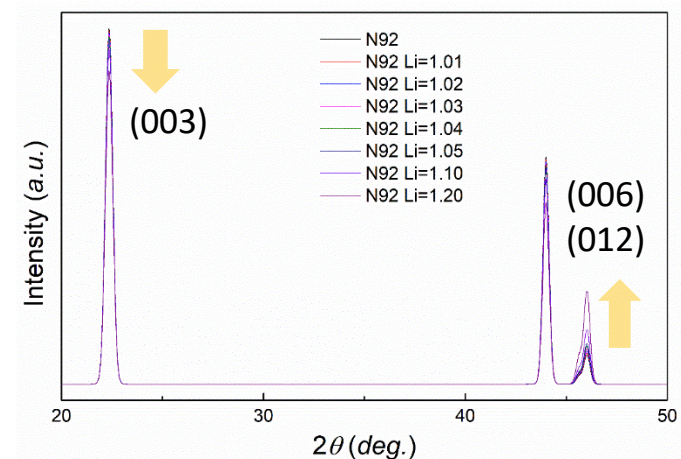
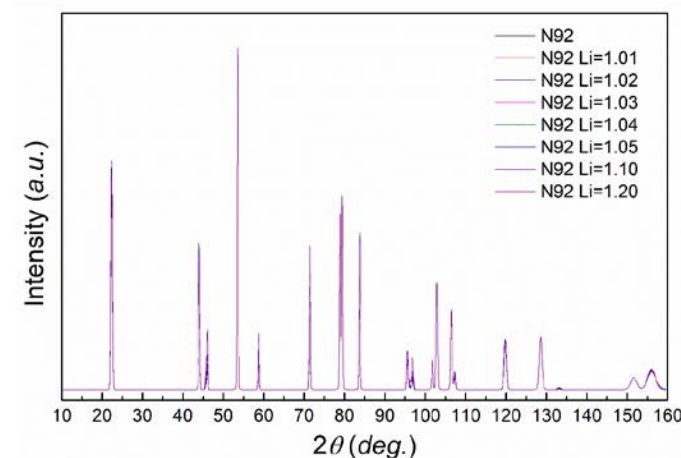
Li-excess Ni-rich layered oxide



XRD simulation

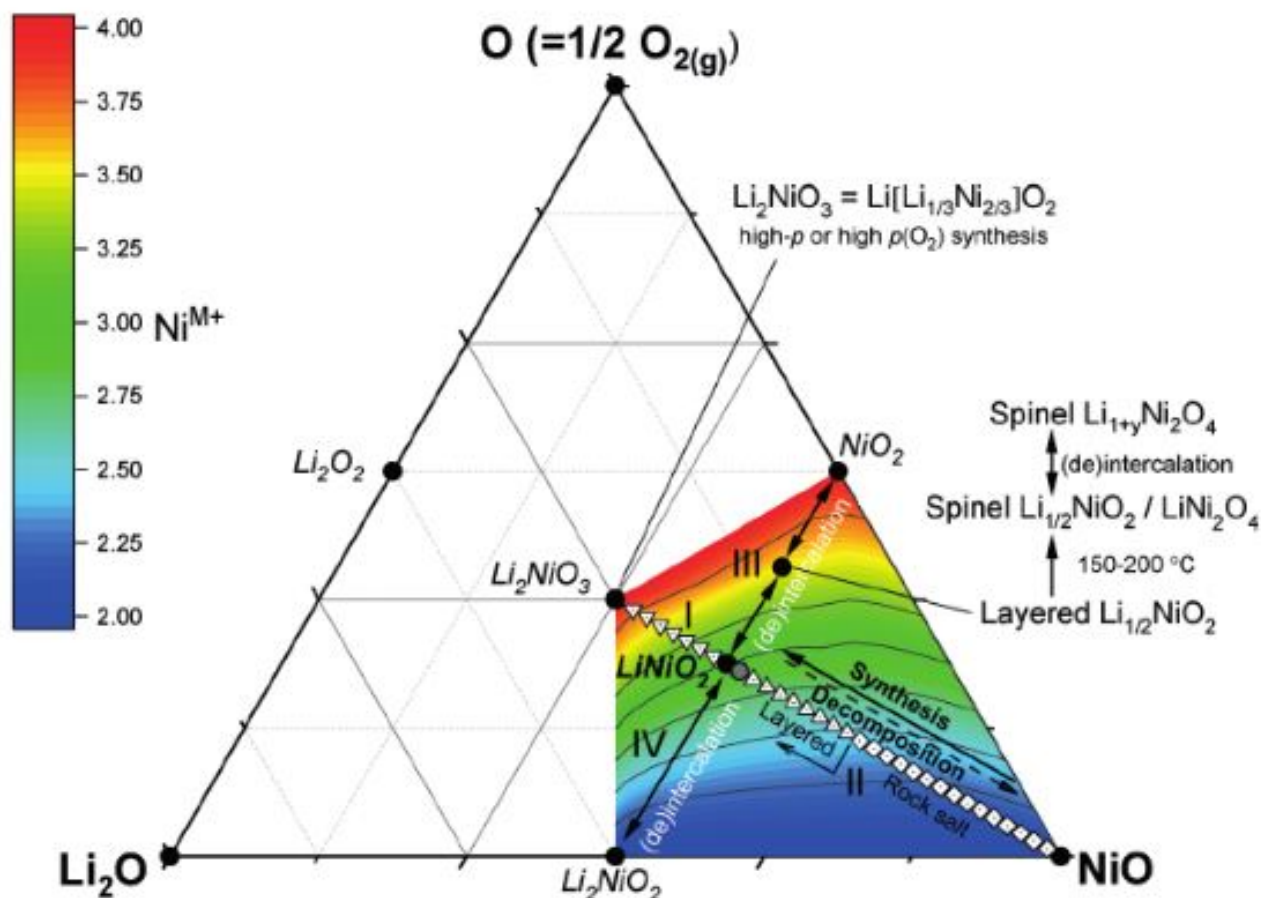


ND simulation

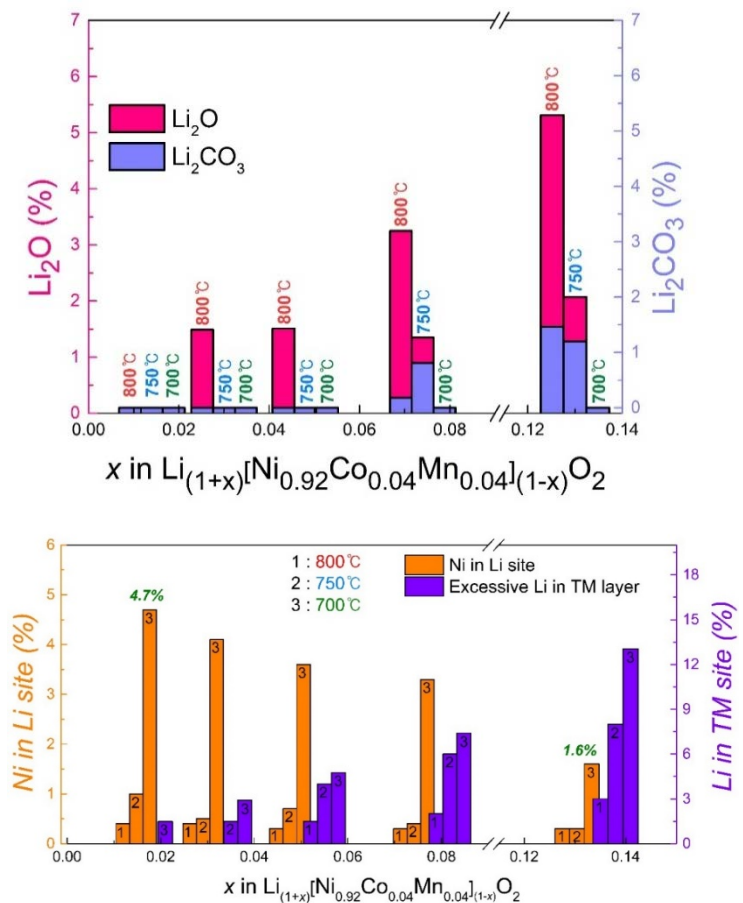


New Electrode Materials for Li/Na-ion Batteries

❖ Li in the lattice of Ni-rich NCM cathode materials – Synthesis temperature & Li contents



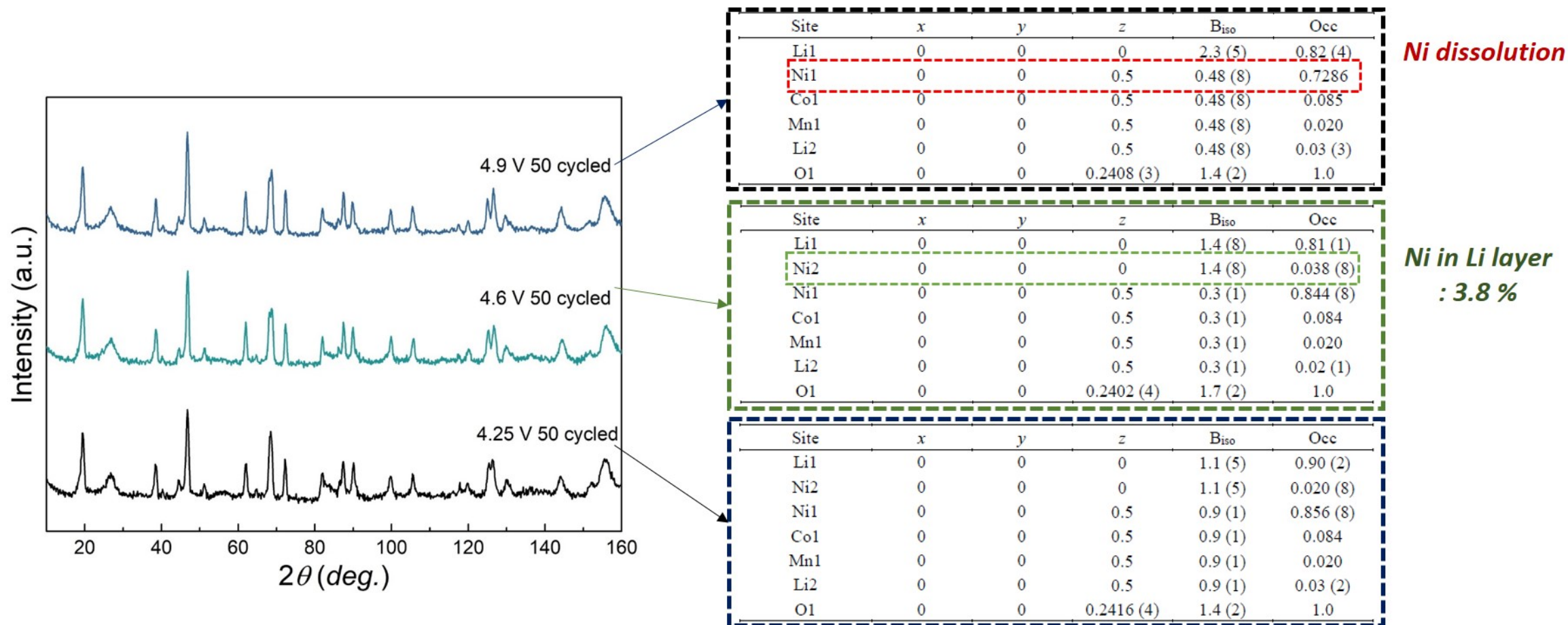
M. Bianchini et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, 58, 2-27



S. H. Song et al. *Chem. Eng. J.* **2022**, 448, 137685.

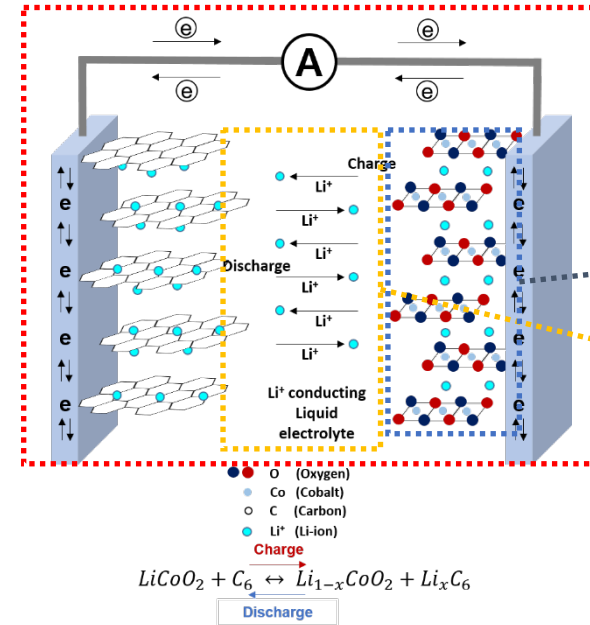
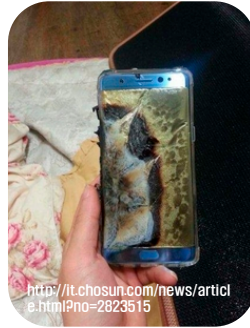
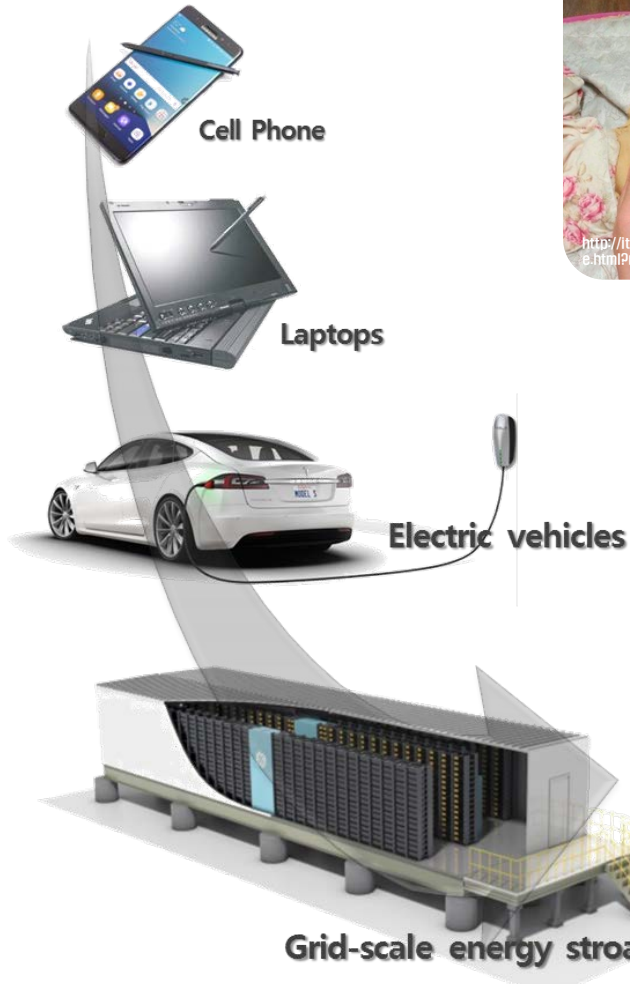
Structural Change after Electrochemical Cycling

❖ Li-Ni intermixing and metal dissolution in Ni-rich NCM cathode materials – Electrochemical cycling



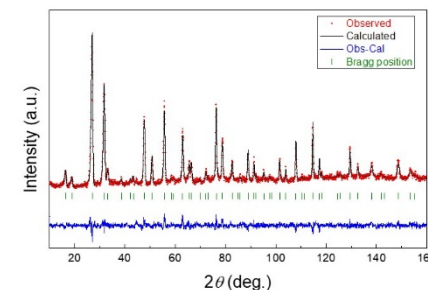
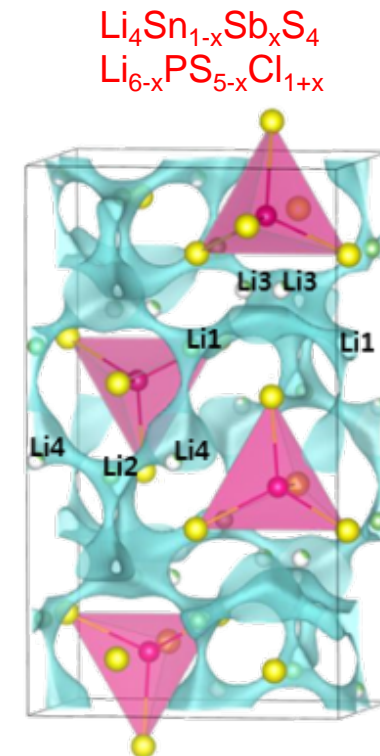
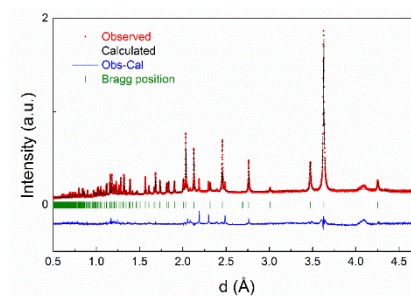
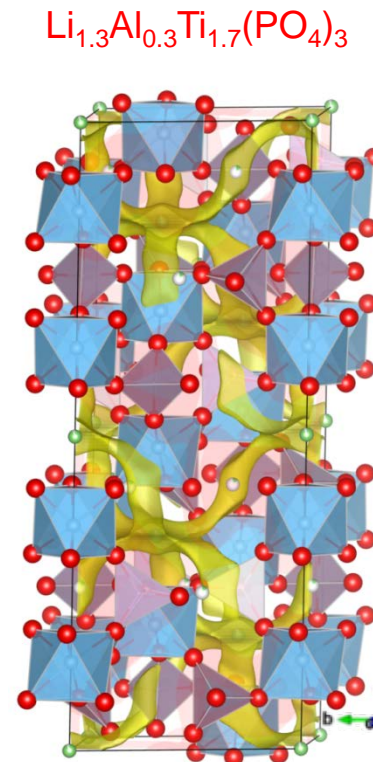
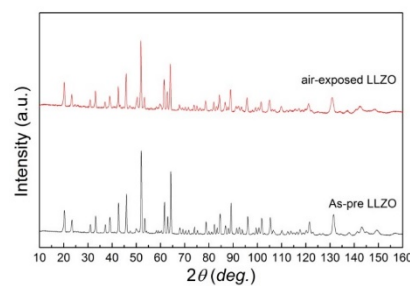
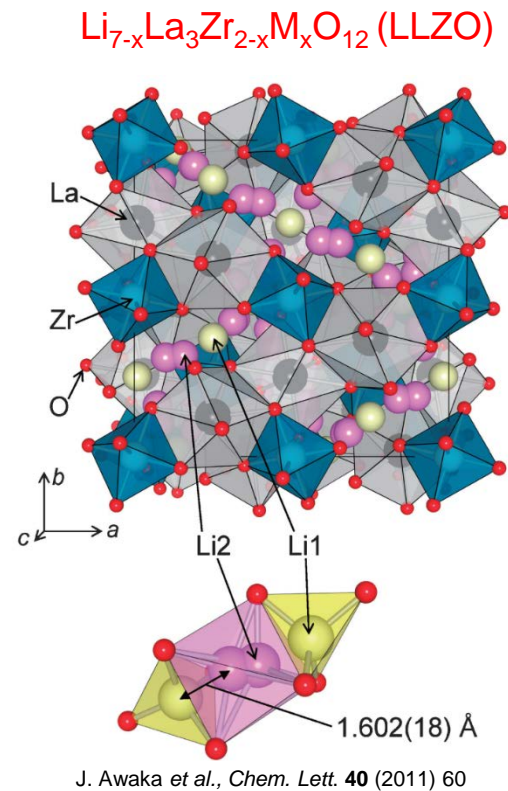
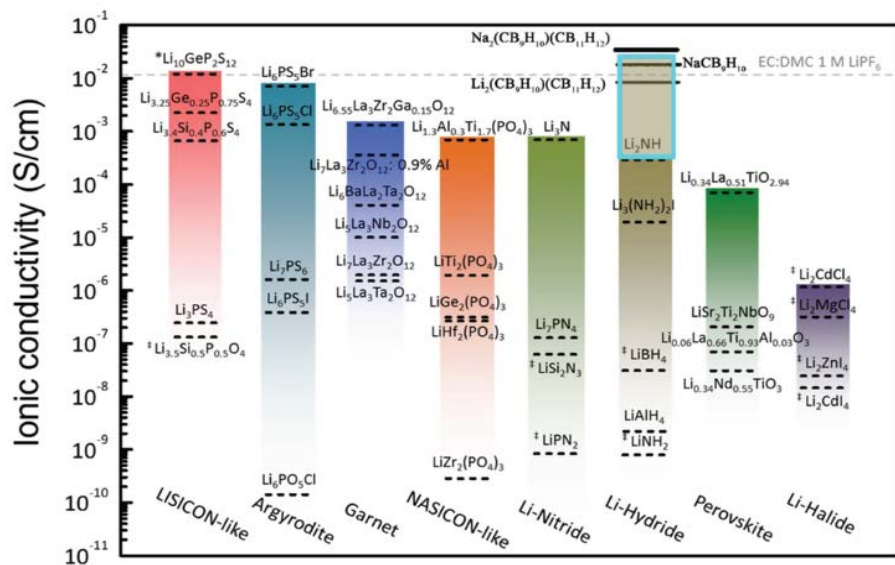
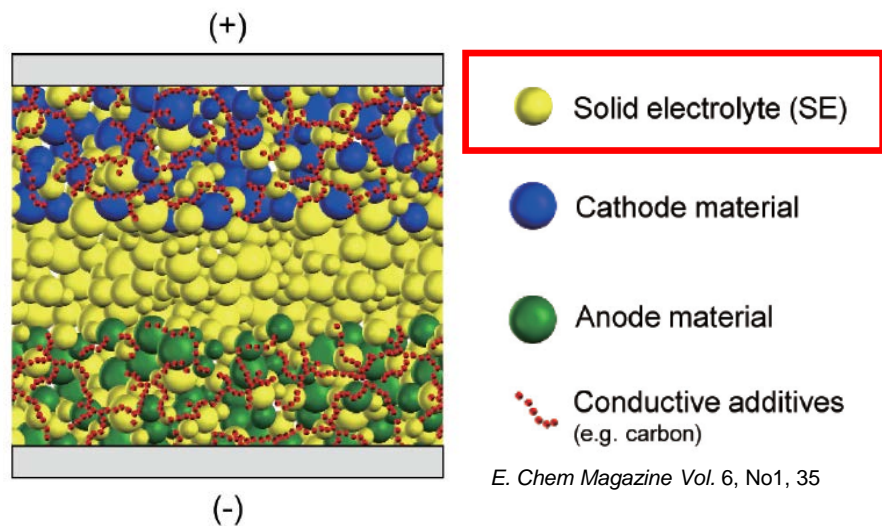
From Li-ion to Solid-State Batteries: Safety

❖ Li-Ion batteries



- **Non-flammable ceramic based solid electrolyte**
→ Safety and high T operation (over 100 °C)
- **Separator free, Usage of Li metal, Bipolar stacking**
→ Large volumetric energy density (800 ~ 900 Wh/L)

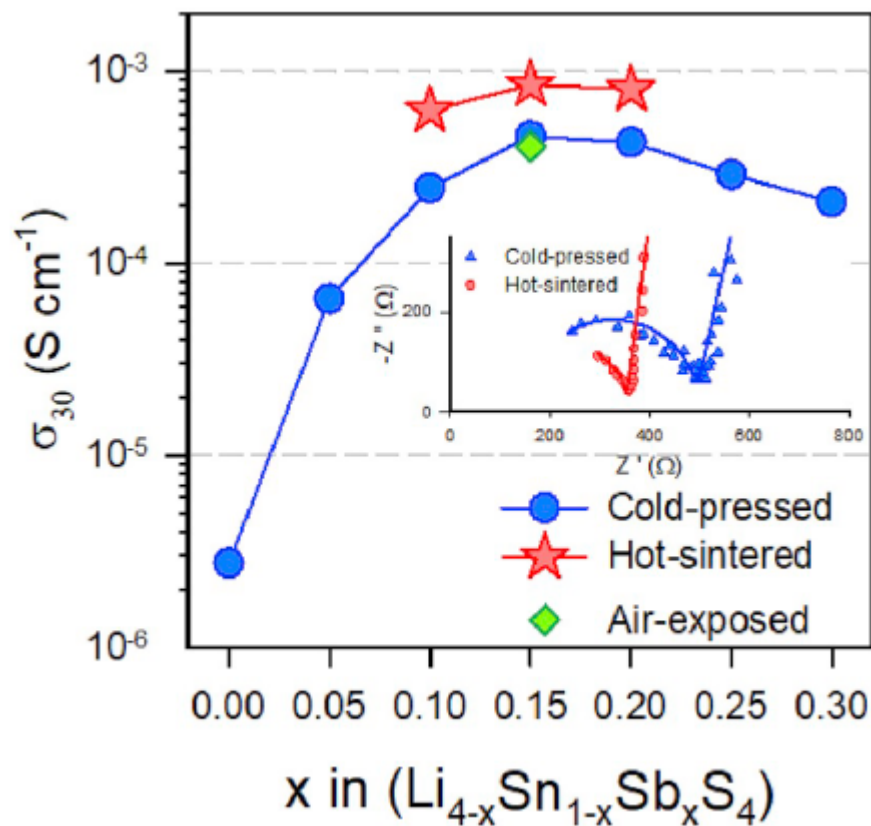
Solid Electrolyte Materials for LRBs



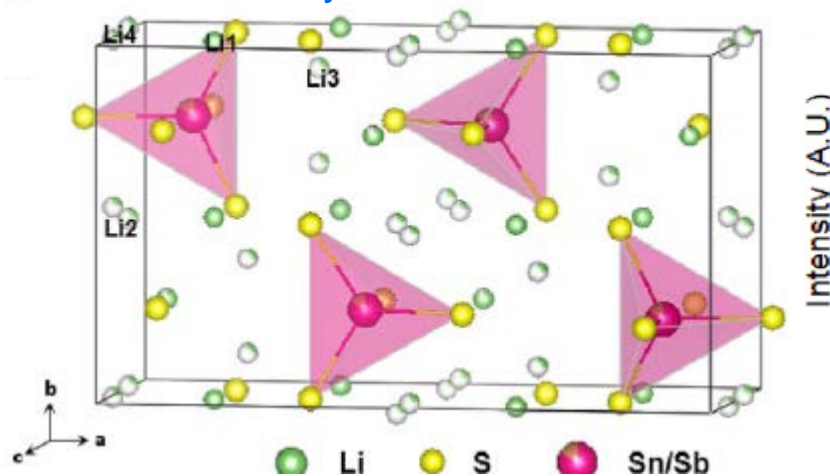
H. Kwak et al. J. Power Sources 2020, 446, 227338.

Solid Electrolyte Materials for LRBs

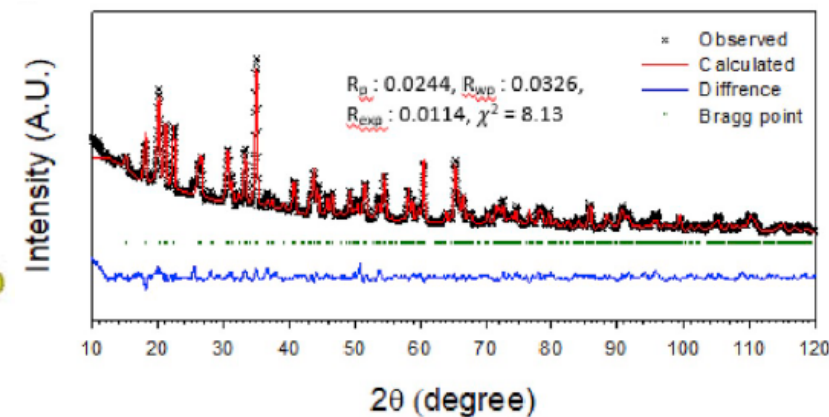
Ionic conductivity



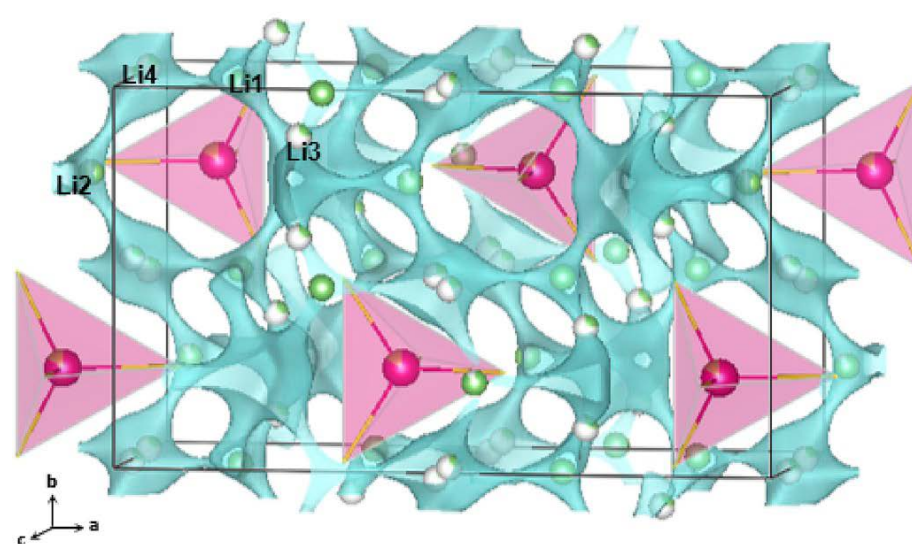
Crystal structure



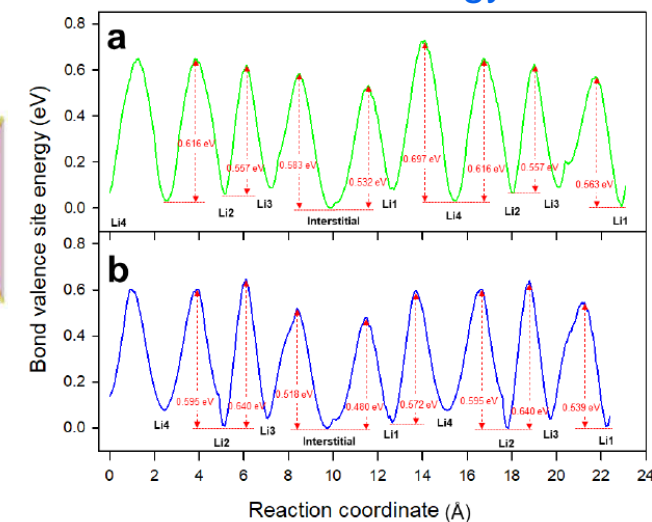
Neutron powder diffraction



BVEL

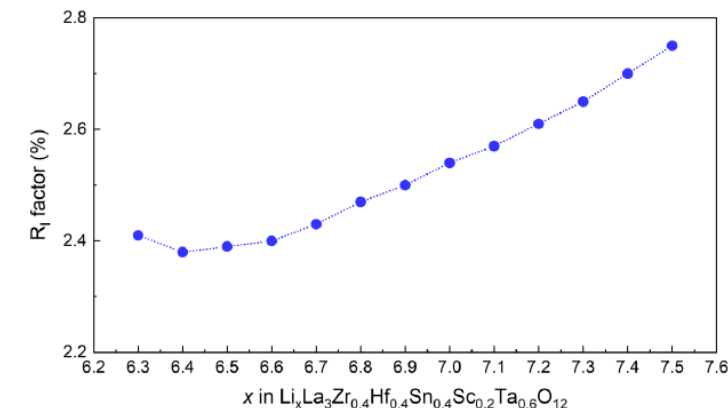
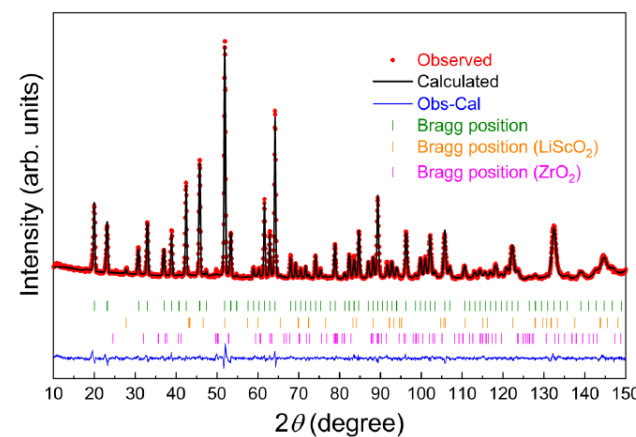
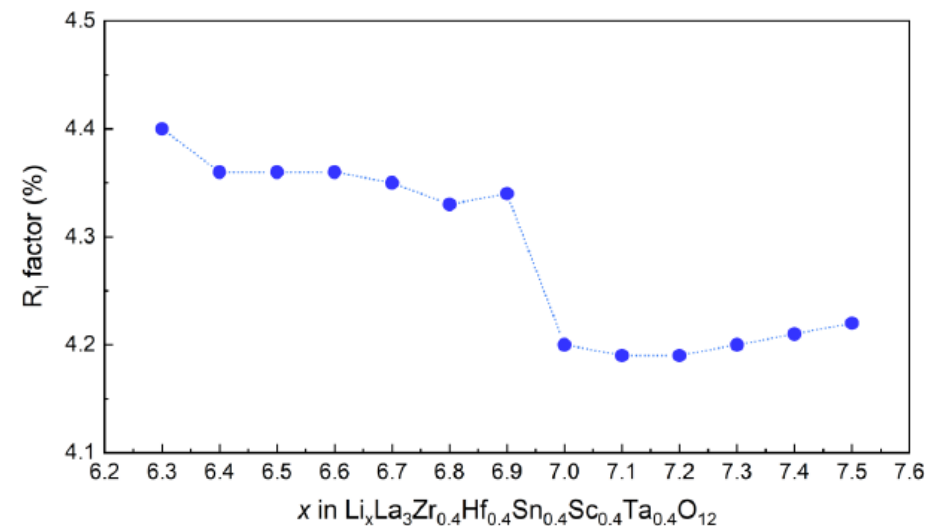
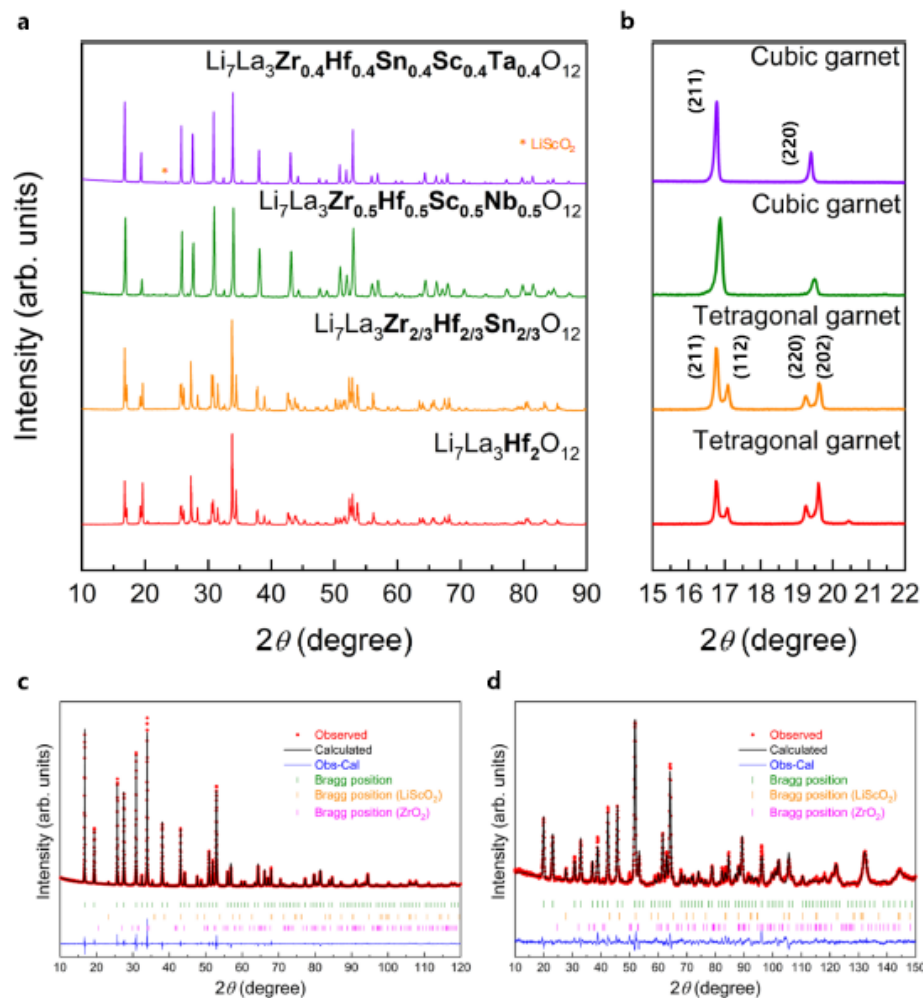


Activation energy



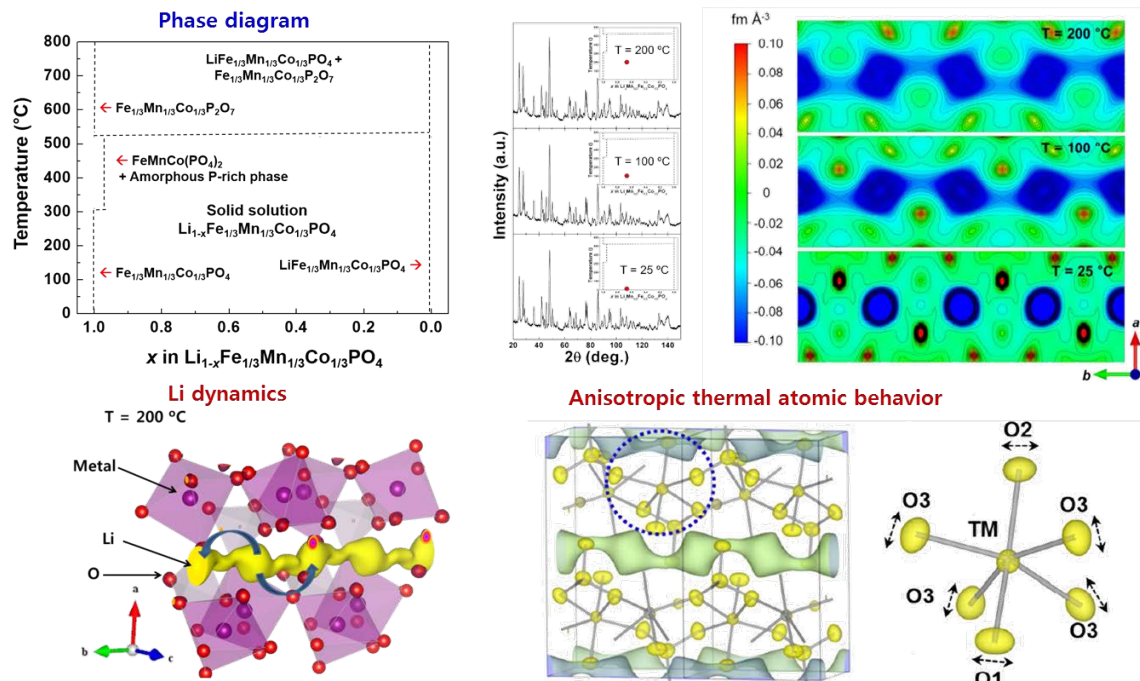
Solid Electrolyte Materials for LRBs

❖ Li stoichiometry in LLZO solid electrolyte



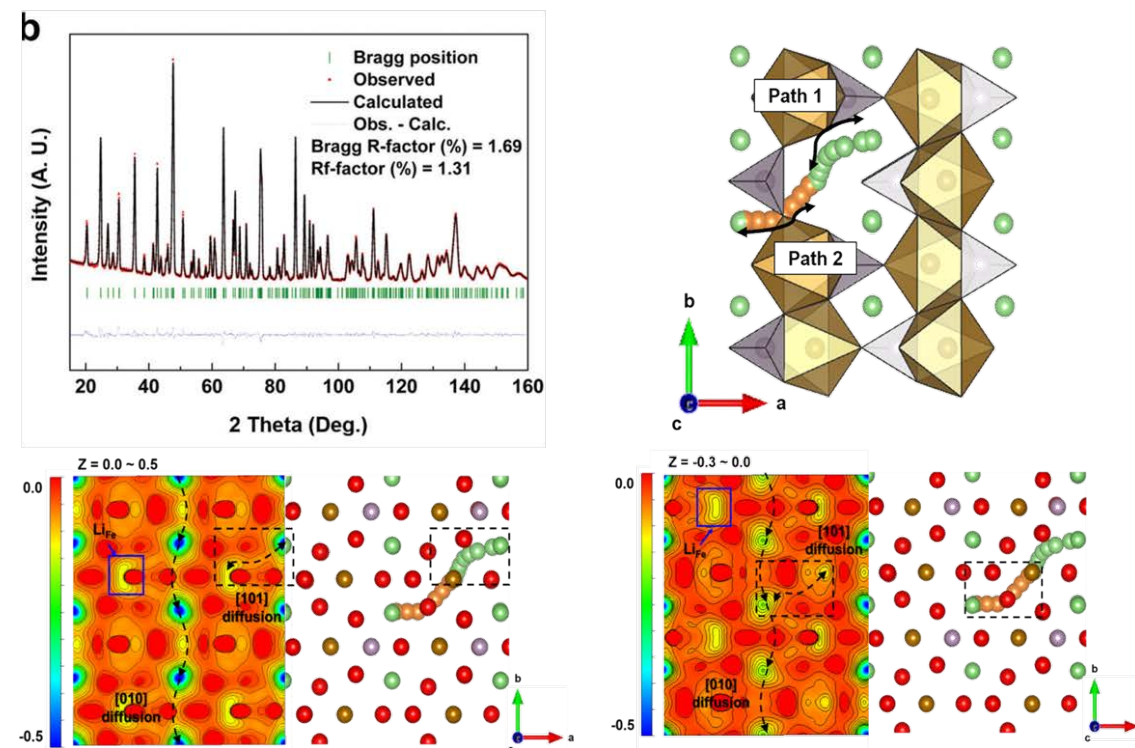
Visualization of Li diffusion motions

❖ Maximum Entropy Method (MEM) analysis of $\text{LiMn}_{1/3}\text{Fe}_{1/3}\text{Co}_{1/3}\text{PO}_4$



K. -Y. Park et al. *CrystEngComm* 2016, 18, 7463.

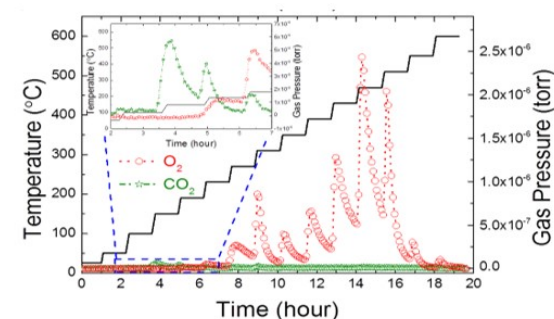
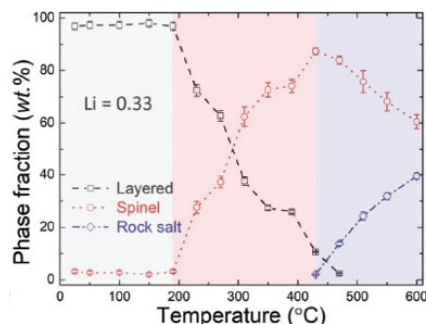
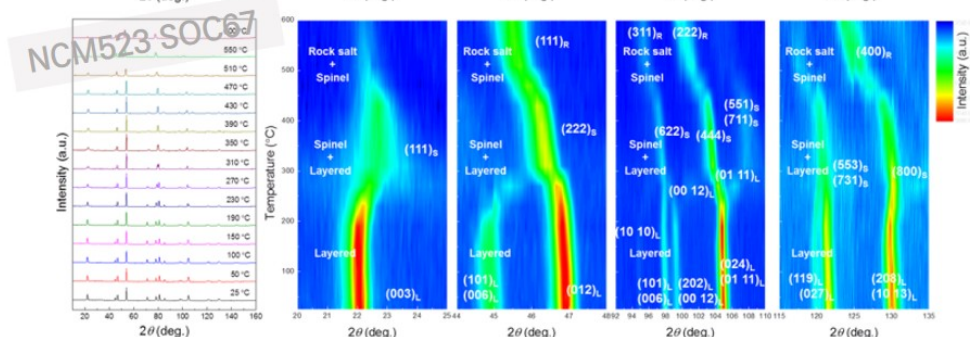
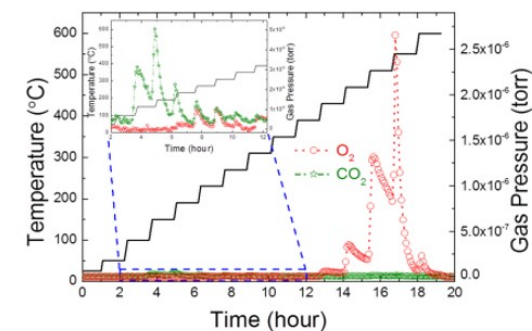
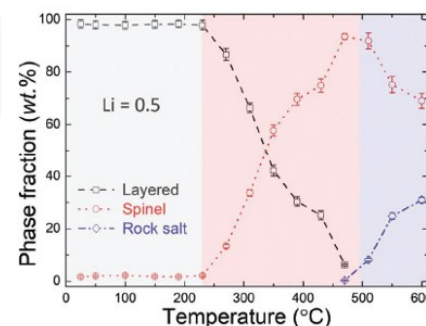
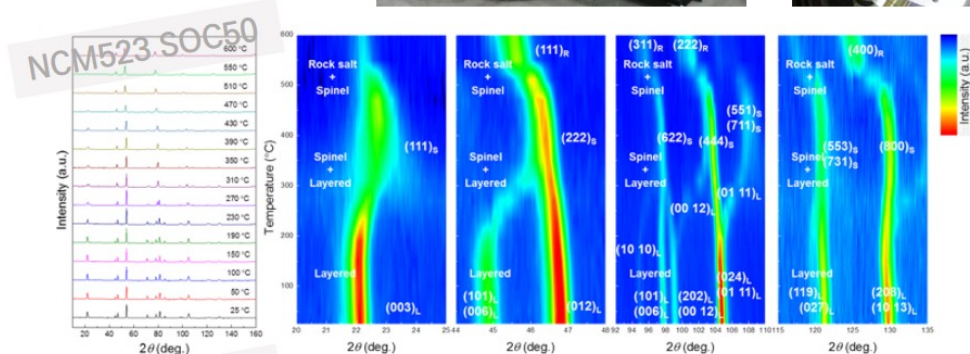
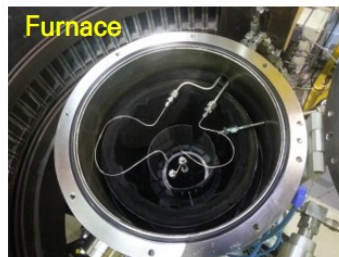
❖ Li-excess olivine with three dimensional Li-path



K. -Y. Park et al. *Energy Environ. Sci.* 2016, 9, 2902.

Thermal Stability of Layered Cathode Materials

❖ Phase change in NCM cathode materials – High temperature of charged samples





THANK YOU