



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2025-0029193
(43) 공개일자 2025년03월04일

- | | |
|--|---|
| <p>(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
H01M 4/58 (2015.01) C01B 25/45 (2006.01)
H01M 10/0525 (2010.01) H01M 10/42 (2014.01)
H01M 4/02 (2006.01) H01M 4/136 (2010.01)</p> <p>(52) CPC특허분류
H01M 4/5825 (2013.01)
C01B 25/45 (2013.01)</p> <p>(21) 출원번호 10-2025-7002844</p> <p>(22) 출원일자(국제) 2023년06월30일
심사청구일자 2025년01월24일</p> <p>(85) 번역문제출일자 2025년01월24일</p> <p>(86) 국제출원번호 PCT/US2023/069527</p> <p>(87) 국제공개번호 WO 2024/007005
국제공개일자 2024년01월04일</p> <p>(30) 우선권주장
63/357,439 2022년06월30일 미국(US)</p> | <p>(71) 출원인
미트라 퓨처 테크놀로지스 인코포레이티드
미국 캘리포니아 94043 마운틴 뷰 테라 벨라 애비뉴 1245</p> <p>(72) 발명자
췌 윌리엄
미국 캘리포니아 94043 마운틴 뷰 테라 벨라 애비뉴 1245 미트라 퓨처 테크놀로지스 인코포레이티드 내</p> <p>고팔 치란지비
미국 캘리포니아 94043 마운틴 뷰 테라 벨라 애비뉴 1245 미트라 퓨처 테크놀로지스 인코포레이티드 내
(뒷면에 계속)</p> <p>(74) 대리인
특허법인태평양</p> |
|--|---|

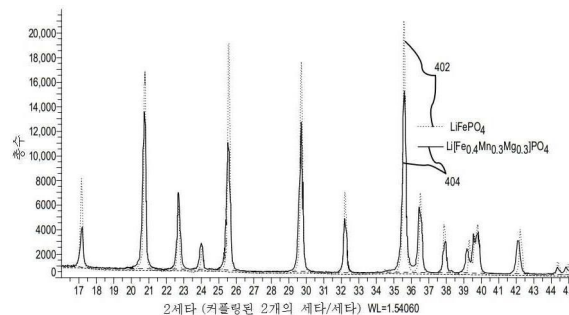
전체 청구항 수 : 총 19 항

(54) 발명의 명칭 교환가능한 리튬 이온 함량 또는 평균 방전 전압을 증가시킴에 의한 올리빈 유형 캐소드의 중량측정 에너지 밀도의 증가

(57) 요약

본 기술은 리튬 금속 폴리염이온(LMX) 화합물을 개시한다. 캐소드로서 LMX 화합물을 포함하는 배터리 셀은 170 mAh/g를 초과하는 중량측정 용량을 가질 수 있다. 본 기술은 배터리 셀의 중량측정 에너지 밀도를 최대화하기 위해 기계 학습을 활용하여 LMX 화합물의 합성 조건 및 화학양론을 제공한다.

대표도



(52) CPC특허분류

H01M 10/0525 (2013.01)

H01M 10/4285 (2013.01)

H01M 4/136 (2013.01)

H01M 2004/021 (2013.01)

H01M 2004/028 (2013.01)

Y02E 60/10 (2020.08)

(72) 발명자

임기필

미국 캘리포니아 94043 마운틴 뷰 테라 벨라 애비
뉴 1245 미트라 퓨처 테크놀로지스 인코포레이티드
내

램퍼트 조던

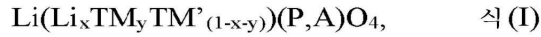
미국 캘리포니아 94043 마운틴 뷰 테라 벨라 애비
뉴 1245 미트라 퓨처 테크놀로지스 인코포레이티드
내

명세서

청구범위

청구항 1

식 (I)로 표시되는 리튬 금속 폴리음이온(LMX) 화합물을 포함하는 분말



여기서 $0.1 \leq x$, $0 \leq y < 1$, 및 $\text{Li}/(\text{TM}' + \text{TM}) > 1$ 이고, 여기서 TM은 Mn, Mg, Zn, Ca, Ni, Co, V, Al, Ti, Zr, Mo, Cr, 또는 기타 전이 금속으로부터 선택되는 하나 이상의 원소이고, 여기서 TM'은 Fe 및 Mn 전이 금속의 조합이다.

청구항 2

청구항 1에 있어서,

식 (I)로 표시되는 화합물을 생성하는 데 필요한 적어도 하나의 공정 변수 또는 적어도 하나의 화학양론 변수는 기계 학습 알고리즘에 의해 제공되는 분말.

청구항 3

청구항 1 또는 청구항 2에 있어서,

TM은 Mo이고, 상기 화합물은 $\text{Li}[\text{Li}]_{0.2}\text{Fe}_{0.2}\text{Mn}_{0.5}\text{Ti}_{0.1}\text{PO}_4$ 로 표시되는 분말.

청구항 4

청구항 1 내지 청구항 3 중 어느 한 항에 있어서,

TM은 V이고, 상기 화합물은 $\text{Li}[\text{Li}]_{0.1}\text{Fe}_{0.8}\text{V}_{0.1}\text{PO}_4$ 로 표시되는 분말.

청구항 5

청구항 1 내지 청구항 4 중 어느 한 항에 있어서,

상기 화합물은 $\text{Li}[\text{Li}]_{0.1}\text{Mn}_{0.6}\text{Mg}_{0.2}\text{V}_{0.1}\text{PO}_4$ 로 표시되는 분말.

청구항 6

청구항 1 내지 청구항 5 중 어느 한 항의 분말을 포함하는 캐소드 활성 물질.

청구항 7

청구항 6의 캐소드 활성 물질을 포함하는 캐소드.

청구항 8

청구항 7의 캐소드;

분리막; 및

애노드;를 포함하는 배터리 셀로서,

상기 배터리 셀은 170 mAh/g를 초과하는 중량측정 용량을 포함하는 배터리 셀.

청구항 9

식 (II)로 표시되는 리튬 망간 포스페이트 화합물을 포함하는 분말:



여기서 $0.15 < x < 0.45$, $0.20 < y < 0.45$ 이고, 여기서 TM은 Mn, Mg, Zn, Ca, Ni, Co, V, Al, Ti, Zr, Mo, 및 Cr 으로부터 선택되는 적어도 하나의 원소이다.

청구항 10

청구항 9에 있어서,

$x = 0.3$, $y = 0.3$, $TM = Mg$ 이고, 상기 화합물은 $Li[Fe_{0.4}Mn_{0.3}Mg_{0.3}]PO_4$ 로 표시되는 분말.

청구항 11

청구항 9 또는 청구항 10에 있어서,

$Li[Fe_{1-x-y}Mn_xMg_y]PO_4$ 는 X선 회절(XRD) 분석을 기초로 $LiFePO_4$ 와 동일한 구조를 갖는 분말.

청구항 12

청구항 9 내지 청구항 11 중 어느 한 항에 있어서,

A는 V, Si, 또는 W 중 하나를 나타내는 분말.

청구항 13

청구항 9 내지 청구항 12 중 어느 한 항의 분말을 포함하는 캐소드 활성 물질.

청구항 14

청구항 13의 캐소드 활성 물질을 포함하는 캐소드.

청구항 15

청구항 14의 캐소드;

분리막; 및

애노드;를 포함하는 배터리 셀로서,

상기 배터리 셀은 170 mAh/g를 초과하는 중량측정 용량을 포함하는 배터리 셀.

청구항 16

청구항 1 내지 청구항 5 중 어느 한 항의 LMX 화합물을 설계하는 방법으로서,

상기 방법은 실험적 접근법과 조합된 기계 학습(ML) 지원 설계를 사용하여 LMX 화합물의 조성을 최적화하여 170 mAh/g 초과 중량측정 용량을 달성하는 단계를 포함하는 방법.

청구항 17

청구항 16에 있어서,

상기 방법은 다음을 추가로 포함하는 방법:

화합물을 합성하여 청구항 1 내지 청구항 5 중 어느 한 항의 분말을 형성하는 단계;

분말 및 청구항 8의 배터리 셀을 전기화학적 성능에 대해 평가하는 단계;

전기화학적 성능 및 분말 정보를 사용하여 기계 학습 모델을 훈련하는 단계;

사양의 집합 내에 속하는 분말 수준 지표의 제약 조건에 따라, 배터리 셀의 에너지 밀도를 출력으로서 사용하여 가우시안 프로세스 모델을 적합하는 단계;

획득 함수를 사용하여 에너지 밀도를 최대화할 가능성이 있는, 다음 이터레이션에서 평가할 N개의 변형을 결정하는 단계;

N개의 변형을 합성하는 단계;

분말 및 배터리 셀의 전기화학적 성능을 평가하는 단계; 및

연속적 이터레이션에서의 차이가 임계값 아래로 떨어질 때까지 실험을 반복하고 ML 모델을 훈련하는 단계.

청구항 18

청구항 9 내지 청구항 12 중 어느 한 항의 LMX 화합물을 설계하는 방법으로서,

상기 방법은 실험 접근법과 조합된 기계 학습(ML) 지원 설계를 사용하여 LMX 화합물의 조성을 최적화하여 170 mAh/g 초과 중량측정 용량을 달성하는 단계를 포함하는 방법.

청구항 19

청구항 18에 있어서,

상기 방법은 다음을 추가로 포함하는 방법:

화합물을 합성하여 청구항 9 내지 청구항 12 중 어느 한 항의 분말을 형성하는 단계;

분말 및 청구항 15의 배터리 셀을 전기화학적 성능에 대해 평가하는 단계;

전기화학적 성능 및 분말 정보를 사용하여 기계 학습 모델을 훈련하는 단계;

사양의 집합 내에 속하는 분말 수준 지표의 제약 조건에 따라, 배터리 셀의 에너지 밀도를 출력으로서 사용하여 가우시안 프로세스 모델을 적합하는 단계;

획득 함수를 사용하여 에너지 밀도를 최대화할 가능성이 있는, 다음 이터레이션에서 평가할 N개의 변형을 결정하는 단계;

N개의 변형을 합성하는 단계;

분말 및 배터리 셀의 전기화학적 성능을 평가하는 단계; 및

연속적 이터레이션에서의 차이가 임계값 아래로 떨어질 때까지 실험을 반복하고 ML 모델을 훈련하는 단계.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 관련 특허 출원에 대한 상호 참조

[0002] 이 특허 출원은 2022년 6월 30일에 출원된 "교환 가능한 Li 이온 함량 및 평균 방전 전압을 증가시킴에 의한 리튬 금속 폴리음이온의 중량측정(gravimetric) 에너지 밀도의 증가"라는 명칭의 미국 특허 출원 일련 번호 63/357,439에 대해 35 U.S.C. § 119(e) 하의 이익을 주장하며, 이의 전문은 본 명세서에 참조로서 포함된다.

[0003] 기술분야

[0004] 이 기술은 리튬 철 포스페이트(LFP) 배터리에 비해 중량측정 에너지 밀도(GED)를 증가시키는 것과 관련이 있으며, 더 구체적으로, 실험 및 기계 학습 모델을 조합하여 교환가능한 리튬 이온 함량 및/또는 평균 방전 전압을 증가시키는 것과 관련이 있다.

배경 기술

[0005] 리튬 이온 배터리는 높은 작동 전압, 높은 에너지 밀도, 및 우수한 사이클 성능으로 인해 전자 기기에서 가장 유망한 휴대용 에너지원으로 널리 채택되었다. 리튬 이온 배터리는 전기 자동차 및 하이브리드 전기 자동차에 사용된다. 이러한 리튬 이온 배터리에서 LiMPO_4 (M=Fe 및 Mn)와 같은 올리빈 유형의 캐소드 물질은 특히 저렴한 비용과 높은 내재적 안전성으로 인해 상당한 관심을 끌었다. 그러나 주로 낮은 전기 전도도로 인해 전기화학적 특성이 좋지 않다.

[0006] M = Mn인 리튬-금속-포스페이트(LMP)는 문헌에서 광범위하게 연구되고 설명되었다. LMP는 리튬 이온 배터리의 캐소드 물질로서 사용되었다. 이 LMP 캐소드 물질은 공칭 방전 전압이 4.1V이므로 리튬 철 포스페이트(LFP)보다 공칭 20%보다 높은 중량측정 에너지 밀도(GED)를 갖는다. 그러나, LMP는 2상 계면의 방향이 리튬 이온(Li^+) 확산 채널을 차단하기 때문에 운동성 및 리튬(Li) 활용이 좋지 않은 문제가 있다. 평균 공칭 전압을 증가시키는

LMP 및 LFP의 복합체가 설명되었지만, 이는 광범위한 적용을 찾지 못하였다.

[0007] 기존 LFP는 비교적 낮은 방전 전압(공칭 3.45V)과 적당한 용량(예로서, 이론적 중량측정 용량은 170 mAh/g인 반면 실제 용량은 140 내지 165 mAh/g)으로 인해 중량측정 에너지 밀도(GED)가 제한적이다.

[0008] PO_4 또는 SiO_4 가 유일한 음이온이고 M이 전이 금속 또는 2개 이상의 전이 금속을 나타내는 LiMPO_4 또는 LiMSiO_4 화합물에 대한 광범위한 연구가 있었다. PO_4 음이온 및 SiO_4 음이온의 혼합물에 대한 연구는 매우 제한적이다. 예를 들어, 미국 특허 제5,910,382A호는 PO_4 음이온 및 SiO_4 음이온의 혼합물을 포함하는 Li 이온 캐소드를 개시한다. 미국 특허 제6,136,472호는 또한 나트륨 초이온 전도체(NASICON) 구조의 혼합된 Li 이온 SiO_4 및 PO_4 조성을 개시하고 $\text{Li}_a\text{M}'_{(2-b)}\text{M}''_b\text{Si}_c\text{P}_{3-c}\text{O}_{12}$ 조성을 포함한다. PO_4 및 SiO_4 의 혼합물은 또한 Na 이온 배터리를 고체 전해질로서 사용되었다. 가장 잘 알려진 예는 식 $\text{Na}_3\text{Zr}_2(\text{PO}_4)(\text{SiO}_4)_2$ 의 NASICON 구조로 결정화된다.

[0009] 다중 모드 분포는 세라믹에서 보다 높은 녹색 밀도를 달성하기 위해 일반적으로 사용되는 기술이다. 일반적인 응용분야 중 하나는 3D 인쇄이다. 바인더 젯팅에서, 높은 녹색 밀도를 달성하는 능력은 분말의 층 두께에 의해 제한되며, 이는 다양한 입자 크기 또는 입자 크기의 다양한 분포를 포함하는 분말을 혼합하여 극복될 수 있다.

[0010] 배터리는 많은 다른 응용품 중에서 전동 공구에서부터 가정용 전력 시스템, 전기 및 하이브리드 자동차에 이르기까지 많은 장치에서 필수적인 부분이다. 리튬 철 포스페이트(LFP)는 전동 공구, 시동 배터리, 및 하이브리드 전기 자동차 등과 같은 전력 응용품을 위해 개발되었다. LFP는 밀도가 낮기 때문에 배터리 전기 차량(BEV)에서 사용하는 데 제한적이다. 배터리는 다른 많은 기술이 구축되는 핵심 기술 기둥이다. 배터리가 사용되는 응용분야가 광범위하기 때문에 해당 응용분야에 적합한 배터리 캐소드 물질을 개발하기 위한 설계 요구사항도 비슷하게 광범위하다. 불행히도, 새로운 배터리를 개발하는 것은 시간이 많이 소요되는 과정일 수 있으며 비용도 많이 든다.

[0011] 기계 학습은 다양한 응용분야에서 유망한 결과를 보여주었다. 재료 과학 분야에서, 기계 학습은 새로운 재료를 개발하고, 기존 재료를 최적화하고, 재료의 특성을 예측하는 데 사용된다. 재료 과학 분야에서 관심 있는 분야 중 하나는 리튬 이온 배터리를 캐소드 물질의 합성이다. 리튬 이온 배터리는 휴대용 전자제품, 전기 자동차, 및 에너지 저장 시스템을 포함한 많은 응용분야에서 사용된다. 이러한 배터리의 성능은 부분적으로는 사용된 캐소드 물질에 따라 달라진다.

[0012] 리튬 철 포스페이트(LFP), 니켈-코발트-알루미늄 산화물(NCA), 및 니켈-코발트-망간 산화물(NMC)은 리튬 이온 배터리에서 일반적으로 사용되는 캐소드 물질이다. 이러한 캐소드 물질의 합성은 다양한 전구체 및 합성 처리 조건을 포함하는 복잡한 과정이다. 전구체 및 합성 처리 조건을 수정하면 캐소드 물질의 특성을 최적화할 수 있다. 그러나, 캐소드 물질의 특성을 최적화하는 경우 전구체 및 전구체의 비율을 선택하고 합성 처리 조건을 제어하는 것은 어렵고, 비용이 많이 들고, 시간이 많이 소요된다.

[0013] 탄소 코팅은 리튬 이온 배터리에서 캐소드 활성 물질의 전도도를 개선하는 데 일반적으로 사용되는 기술이다. 탄소 코팅은 다른 고유 특성을 변경하지 않고도 캐소드 활성 물질의 전기 전도도를 개선할 수 있다. LFP 상에 탄소를 균일하게 코팅하면 전하 응집 및 바람직하지 않은 화학 반응을 방지하는 데 도움이 된다. LFP, LMP, 또는 리튬 금속 폴리음이온(LMX) 화합물과 같은 캐소드 활성 물질 또는 화합물에 탄소 코팅을 하면, 탄소 코팅된 캐소드 분말을 함유하는 배터리 셀의 사이클링 성능에 영향을 미칠 수 있다.

[0014] 절감된 비용으로 개선된 특성을 갖는 캐소드 물질이 바람직하다. 그러나, 개선된 특성을 가진 캐소드 물질의 개발 주기는 매우 길다. 따라서, 캐소드 물질 합성 및 배터리 셀 생산을 가속화하는 방법을 개발할 필요성이 여전히 존재한다.

발명의 내용

[0015] 본 기술은 배터리 셀의 중량측정 에너지 밀도를 증가시키기 위해 기계 학습을 활용하여 식 (I) 및 식 (II)로 표시되는 리튬 금속 폴리음이온(LMX) 화합물의 합성 조건 및 화학양론을 제공한다.

[0016] 일 측면에서, 리튬 금속 폴리음이온(LMX) 화합물을 포함하는 분말은 식 (I)로 표시된다:

[0017] $\text{Li}(\text{Li}_x\text{TM}_y\text{TM}'_{(1-x-y)})(\text{P},\text{A})\text{O}_4$, 식 (I)

[0018] 여기서 $0.1 \leq x$, $0 \leq y < 1$, 및 $\text{Li}/(\text{TM}+\text{TM}') > 1$ 이고, 여기서 TM은 Mn, Mg, Zn, Ca, Ni, Co, V, Al, Ti, Zr, Mo, Cr,

또는 기타 전이 금속으로부터 선택되는 적어도 하나의 원소이다. TM'은 Fe 및 Mn 전이 금속의 조합이다.

- [0019] 일부 변형예에서, 식 (I)에 표시된 화합물을 생성하기 위한 적어도 하나의 공정 변수 또는 적어도 하나의 화학 양론 변수는 기계 학습 알고리즘에 의해 제공될 수 있다.
- [0020] 일부 변형예에서, TM은 Mo이고, 화합물은 $\text{Li}[\text{Li}]_{0.2}\text{Fe}_{0.2}\text{Mn}_{0.5}\text{Ti}_{0.1}\text{PO}_4$ 로 표시된다.
- [0021] 일부 변형예에서, TM은 V이고, 화합물은 $\text{Li}[\text{Li}]_{0.1}\text{Fe}_{0.8}\text{V}_{0.1}\text{PO}_4$ 로 표시된다.
- [0022] 일부 변형예에서, 화합물은 $\text{Li}[\text{Li}]_{0.1}\text{Mn}_{0.6}\text{Mg}_{0.2}\text{V}_{0.1}\text{PO}_4$ 로 표시된다.
- [0023] 또 다른 측면에서, LFP 화합물을 설계하기 위한 방법이 제공된다. 방법은 실험적 접근법과 조합된 기계 학습(ML) 알고리즘 지원 설계를 사용하여 LFP 화합물의 조성을 최적화하여 170 mAh/g 초과 중량당 용량을 달성하는 것을 포함할 수 있다.
- [0024] 일부 변형예에서, 방법은 화합물을 합성하여 분말을 형성하는 단계를 추가로 포함할 수 있다. 방법은 또한 분말 및 전기화학적 성능에 대해 배터리 셀을 평가하는 단계를 포함할 수 있다. 방법은 또한 전기화학적 성능 및 분말 정보를 사용하여 기계 학습(ML) 모델을 훈련하는 단계를 포함할 수 있다. 방법은 또한 세트 사양 내에 속하는 분말 수준 지표의 제약 조건에 따라, 배터리 셀의 에너지 밀도를 출력으로서 사용하여 가우시안 프로세스 모델을 적합하는 단계를 포함할 수 있다. 방법은 또한 획득 함수를 사용하여 에너지 밀도를 증가시킬 가능성이 있는, 다음 이터레이션(iteration)에서 평가할 N개의 변형을 결정하는 단계를 포함할 수 있다. 방법은 또한 N개의 변형을 합성하는 단계를 포함할 수 있다. 방법은 또한 연속적 이터레이션에서의 차이가 임계값 아래로 떨어질 때까지 분말 및 배터리 셀의 전기화학적 성능을 평가하고, 실험을 반복하고, 및 ML 모델을 훈련하는 단계를 포함할 수 있다.
- [0025] 일부 변형예에서, 캐소드 활성 물질은 LMX 분말을 포함할 수 있다.
- [0026] 일부 변형예에서, 캐소드는 캐소드 활성 물질을 포함할 수 있다.
- [0027] 일부 변형예에서, 배터리 셀은 캐소드, 분리막, 및 애노드를 포함할 수 있고, 배터리 셀은 170 mAh/g를 초과하는 중량당 용량을 포함한다.
- [0028] 추가 측면에서, 식 (II)로 표시되는 리튬 망간 포스페이트 화합물을 포함하는 분말:
- [0029] $\text{Li}[\text{Fe}_{1-x-y}\text{Mn}_x\text{TM}_y](\text{P},\text{A})\text{O}_4$ 식(II)
- [0030] 여기서 $0.15 < x < 0.45$, $0.20 < y < 0.45$ 이고, 여기서 TM은 Mn, Mg, Zn, Ca, Ni, Co, V, Al, Ti, Zr, Mo, 및 Cr으로부터 선택되는 적어도 하나의 원소이다.
- [0031] 일부 변형예에서, 화합물은 $\text{Li}[\text{Fe}_{0.4}\text{Mn}_{0.3}\text{Mg}_{0.3}]\text{PO}_4$ 를 포함한다.
- [0032] 일부 변형예에서, 화합물 $\text{Li}[\text{Fe}_{1-x-y}\text{Mn}_x\text{Mg}_y]\text{PO}_4$ 는 X선 회절(XRD) 분석을 기초로 LiFePO_4 와 동일한 구조를 갖는다.
- [0033] 일부 변형예에서, 식 (I) 및 식 (II)의 A는 V, Si, 또는 W 중 하나를 나타낸다.

도면의 간단한 설명

- [0034] 본 기술의 다양한 이점 및 특징은 첨부된 도면에 도시된 특정 실행을 참조함으로써 명확해질 것이다. 본 기술분야의 통상의 기술자는 이러한 도면이 본 기술의 일부 예만을 보여주고 본 기술의 범위를 이러한 예에 국한하지 않는다는 것을 이해할 것이다. 나아가, 숙련된 기술자는 첨부된 도면을 사용하여 추가적인 구체성 및 세부사항과 함께 서술되고 설명된 본 기술의 원리를 이해할 것이다. 여기서:
- 도 1은 개시된 기술의 일부 측면에 따른 배터리 셀의 위에서 아래로 본 모습을 도시한다;
- 도 2는 개시된 기술의 일부 측면에 따른 배터리 셀의 층 세트의 측면도를 도시한다;
- 도 3은 개시된 기술의 일부 측면에 따른 분말 및 셀 수준 둘 다에서 캐소드 합성 및 자격부여 단계를 도시하는 작업흐름도이다;
- 도 4는 개시된 기술의 일부 측면에 따른 LiFePO_4 및 $\text{Li}[\text{Fe}_{0.4}\text{Mn}_{0.3}\text{Mg}_{0.3}]\text{PO}_4$ 화합물의 X선 회절(XRD) 패턴을 도시한

다;

도 5는 개시된 기술의 일부 측면에 따른 $\text{Li}[\text{Fe}_{0.4}\text{Mn}_{0.3}\text{Mg}_{0.3}]\text{PO}_4$ 화합물의 충전 및 방전 데이터를 도시한다;

도 6은 개시된 기술의 일부 측면에 따른 $\text{Li}[\text{Fe}_{0.4}\text{Mn}_{0.3}\text{Mg}_{0.3}]\text{PO}_4$, $\text{LiFe}_{0.6}\text{Mn}_{0.4}\text{PO}_4$, LiMnPO_4 , 및 LiFePO_4 화합물에 대한 충전 또는 방전 동안의 용량 대비 전압의 비교를 도시한다;

도 7은 개시된 기술의 일부 측면에 따른 인식 모듈 및/또는 하나 이상의 검증 모듈을 실행하는 데 사용될 수 있는 딥 러닝 신경망의 예를 도시한다; 및

도 8은 개시된 기술의 일부 측면을 실행할 수 있는 예시적 프로세서 기반 시스템을 도시한다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0035] 아래에 제시된 상세한 설명은 해당 기술의 다양한 구성에 대한 설명으로 의도된 것이며 해당 기술을 실시할 수 있는 유일한 구성을 나타내려는 것이 아니다. 첨부된 도면은 본 명세서에 통합되어 있으며 상세한 설명의 일부를 구성한다. 상세한 설명은 해당 기술에 대한 보다 철저한 이해를 제공하기 위한 구체적인 세부사항을 포함한다. 그러나, 해당 기술이 본 명세서에 제시된 구체적인 세부사항에 국한되지 않으며 이러한 세부사항 없이 실시될 수 있다는 것은 명확하고 명백할 것이다. 일부 경우에, 해당 기술의 개념을 모호하게 하지 않기 위해 구조 및 구성요소가 블록 다이어그램 형태로 표시된다.

[0036] 이러한 특허, 특허 출원, 및 간행물의 개시내용은 전체로 본 명세서에 참조로서 포함되어 본 명세서에 설명되고 청구된 발명의 날짜에 본 기술분야의 숙련된 기술자에게 알려진 최신 기술을 보다 충분히 설명한다. 특허, 특허 출원, 및 간행물 및 이 개시내용 사이에 임의의 불일치가 있는 경우 본 개시내용이 우선한다.

[0037] 달리 정의되지 않는 한, 본 명세서에 사용된 모든 기술 및 과학 용어는 본 발명이 속하는 기술분야의 통상의 기술자가 일반적으로 이해하는 것과 동일한 의미를 갖는다. 본 명세서에서 그룹 또는 용어에 대해 제공된 초기 정의는 달리 표시되지 않는 한 본 명세서 전체에서 개별적으로 또는 다른 그룹의 일부로서 해당 그룹 또는 용어에 적용된다.

[0038] 본 발명의 기본 원리를 모호하게 하지 않기 위해 본 기술분야의 숙련된 기술자에게 알려진 리튬 이온 배터리 기술의 잘 알려진 특징은 생략되거나 단순화되었다. 다음 설명의 일부는 본 기술분야의 숙련된 기술자가 일반적으로 사용하는 용어를 사용하여 제시될 것이다.

[0039] i. 정의

[0040] 배터리 또는 배터리 셀의 "용량"은 배터리에 저장된 전하의 척도이며 배터리에 함유된 활성 물질의 질량에 의해 결정된다. 용량은 특정 지정된 조건 하에서 배터리에서 추출될 수 있는 최대 전하량을 나타낸다. 배터리는 시간 경과에 따라 전달될 수 있는 암페어 단위의 방전 전류를 갖는다. 배터리의 용량은 암페어-시간(Ah)으로 표시된다.

[0041] "중량측정 용량"은 단위 질량당 용량(mAh/g)이다. 중량측정 용량은 비용량이라고도 지칭된다.

[0042] 배터리 또는 배터리 셀의 "중량측정 에너지 밀도", 또는 비에너지는 배터리가 그 중량에 비해 얼마나 많은 에너지를 함유하는지 측정한 것이며 일반적으로 와트시/킬로그램(W-hr/kg)으로 표시된다.

[0043] 배터리 또는 배터리 셀의 "부피측정(volumetric) 에너지 밀도"는 배터리가 그 부피에 비해 얼마나 많은 에너지를 함유하는지 측정한 것이며 일반적으로 와트시/리터(W-hr/리터)로 표시된다.

[0044] "탭 밀도"는 분말의 물질 특성이다. 분말의 탭 밀도는 분말 베드의 정의된 탭핑 단계 후 결정된다. 더 구체적으로, 탭 밀도는 느슨한 분말 베드가 아니라 정의된 수의 탭핑 단계 후의 베드를 기반으로 한, 입자 사이의 기공 및 공극을 고려한다. 분말의 탭 밀도는 분말 베드의 정의된 탭핑 단계 후 분말이 차지하는 부피에 대한 분말의 질량을 측정한 것이다. 탭 밀도는 분말의 벌크 밀도와 다르며, 분말을 측정 실린더에 느슨하게 붓는 경우 결정될 수 있다. 벌크 밀도는 느슨한 분말 베드의 기공 및 공극을 고려한다.

[0045] 산화-환원(산화환원) 반응은 2개 종 사이의 전자 전달을 포함하는 일종의 화학 반응이다. 산화-환원 반응은 분자, 원자, 또는 이온의 산화수가 전자를 얻거나 잃음으로써 변하는 임의의 화학 반응이다.

[0046] ii. 개요

- [0047] 개시된 기술은 리튬-철-포스페이트(LFP) 배터리의 중량측정 에너지 밀도(GED)를 증가시키기 위한 기술의 필요성을 다룬다. LFP의 GED는 비교적 낮은 방전 전압(예로서, 약 3.4V) 및 적당한 용량(이론적 170 mAh/g; 실제 140 내지 165 mAh/g)에 의해 제한된다. 3원 캐소드 물질과 경쟁하기 위해서는 GED를 증가시키는 것이 유용하다. LFP의 GED는 화학양론을 변경하여 추가적인 교환가능한 Li를 첨가하고 철(Fe)을 보다 높은 산화 상태를 허용하는 금속으로 대체하거나 음이온 PO_4 에서 인(P)을 부분적으로 대체하여 인의 산화 상태를 낮추고 인을 산화환원 활성으로 만들어 Li를 적절히 전하 보상함으로써 증가된다.
- [0048] 리튬(Li) 함량, 특성, Fe 자리의 도핑 양, 및 합성 조건은 능동 학습이라고 불리는, 실험적 접근법과 조합된 기계 학습(ML) 지원 설계를 사용하여 최적화될 수 있다. ML 지원 설계에서 생성된 리튬 금속 폴리음이온(LMX) 화합물은 그의 용량 및/또는 평균 방전 전압을 증가시킴으로써 기존 LFP 화합물보다 보다 높은 GED를 가질 수 있다.
- [0049] 본 기술은 성능(에너지 밀도 Wh/리터) 대 비용(\$/kWh) 곡선에서 입증된 바와 같이, 기존 LFP 및 Ni 풍부 니켈 망간 코발트(NMC) 캐소드과 비교하여 비용 대비 성능이 보다 나은 개선된 철 풍부 캐소드를 포함한다. 개시된 철 풍부 캐소드 설계는 NMC622와 비슷한 최고 성능을 달성할 수 있고 향상된 탭 밀도, 양이온 및 폴리음이온 화학 변화의 조합을 통해 최대 20% 향상된 에너지 밀도, 미국 공급망을 통해 쉽게 입수할 수 있는 원자재 활용을 포함한 여러가지 이점을 제공한다.
- [0050] 더 구체적으로, 본 기술은 다른 지표를 손상시키지 않고 중량측정 에너지 밀도를 향상시키기 위해 철 및 포스페이트 폴리음이온을 대체한다. $LiFePO_4$ 는 식 단위당 하나의 Li를 추출할 수 있다. 오르토실리케이트(즉, 실리케이트 음이온 SiO_4^{4-} 및 임의의 그의 염 및 에스테르)는 또 다른 종류의 캐소드이다. 예를 들어, Li_2MSiO_4 는 예시적 오르토실리케이트이며, 여기서 M은 하나 이상의 전이 금속을 나타낸다. 이러한 오르토실리케이트는 종종 보다 낮은 산화환원 전압을 갖지만 M이 산화 상태를 2^+ 에서 3^+ 로 4^+ 로 변경하여 물질의 용량을 실질적으로 2배로 늘리므로, 식 단위당 최대 2개의 Li를 추출할 수 있다. 그러나, 실리케이트 시스템은 Li이 시스템 내부 및 외부로 삽입되면서 결정 구조가 다양한 상 전이를 겪기 때문에 사이클 수명이 불량한 문제가 있다.
- [0051] 본 기술은 또한 Fe를 M으로, PO_4 를 SiO_4 로 동시에 대체하는 것을 포함하는데, 이는 실리케이트의 보다 높은 이론적 에너지 밀도를 활용하고 포스페이트 폴리음이온의 안정화 효과를 통해 짧은 사이클 수명 제한을 극복한다.
- [0052] **iii. 배터리 셀**
- [0053] 도 1은 개시된 기술의 일부 측면에 따른 배터리 셀(100)의 위에서 아래로 본 모습을 도시한다. 배터리 셀(100)은 소비자, 의료, 항공우주, 방위, 및/또는 운송 응용분야에서 사용되는 장치에 전력을 공급하는 데 사용되는 리튬 이온 배터리 셀에 해당할 수 있다.
- [0054] 배터리 셀(100)은 캐소드 활성 물질을 갖는 캐소드, 분리막, 및 애노드 활성 물질을 갖는 애노드를 포함하는 여러 층을 함유하는 스택(102)을 포함한다. 더 구체적으로, 스택(102)은 캐소드 활성 물질의 하나의 스트립(예로서, 리튬 화합물로 코팅된 알루미늄 호일) 및 애노드 활성 물질의 하나의 스트립(예로서, 탄소로 코팅된 구리 호일)을 포함할 수 있다. 스택(102)은 또한 캐소드 활성 물질의 하나의 스트립 및 애노드 활성 물질의 하나의 스트립 사이에 배치된 분리막 물질(예로서, 전도성 중합체 전해질)의 하나의 스트립을 포함한다. 캐소드, 애노드, 및 분리막 층은 평면 구성으로 평평하게 놓여질 수 있다.
- [0055] 인클로저는, 비제한적으로, 가요성 파우치, 경질 용기 등과 같은 파우치를 포함할 수 있다. 도 1로 되돌아가서, 배터리 셀(100)을 조립하는 동안, 스택(102)은 인클로저 내에 동봉되어 있다. 스택(102)은 평면 또는 권취된 구성일 수 있지만, 다른 구성도 가능하다.
- [0056] 스택(102)은 또한 캐소드 및 애노드에 커플링된 일층의 전도성 탭(106)을 포함할 수 있다. 전도성 탭(106)은 인클로저의 셀(예를 들어, 밀봉 테이프(104)를 사용하여 형성)을 통해 확장되어 배터리 셀(100)에 대한 단자를 제공할 수 있다. 이후 전도성 탭(106)은 배터리 셀(100)을 하나 이상의 다른 배터리 셀과 전기적으로 커플링하여 배터리 팩을 형성하는 데 사용될 수 있다. 배터리 셀은 배터리 전기 자동차에 사용될 수 있다. 일부 변형예에서, 배터리 셀(100)은 코인 셀일 수 있다.
- [0057] 배터리는 임의의 구성으로 배터리 팩에 조합될 수 있다. 예를 들어, 배터리 팩은 배터리 셀을 직렬, 병렬, 또는 직렬-및-병렬 구성으로 커플링하여 형성될 수 있다. 이러한 커플링된 셀은 하드 케이스에 동봉되어 배터리 팩을 완성하거나 휴대용 컴퓨터, 태블릿 컴퓨터, 휴대전화, 개인용 디지털 보조기기(PDA), 디지털 카메라, 및/또는

휴대용 미디어 플레이어와 같은 휴대용 전자 기기의 인클로저 내에 내장될 수 있다.

[0058] 도 2는 개시된 기술의 일부 측면에 따른 배터리 셀에 대한 한 세트의 층의 측면도를 나타낸다. 층 세트는 캐소드 집전체(202), 캐소드 활성 물질(204), 분리막(206), 애노드 활성 물질(208), 및 애노드 집전체(210)를 포함할 수 있다. 캐소드 집전체(202) 및 캐소드 활성 물질(204)은 배터리 셀을 위한 캐소드를 형성할 수 있고, 애노드 집전체(210) 및 애노드 활성 물질(208)은 배터리 셀을 위한 애노드를 형성할 수 있다. 배터리 셀을 생성하기 위해, 층 세트는 평면 구성으로 적층되거나 적층된 후 권취된 구성으로 감길 수 있다.

[0059] 위에서 언급한 바와 같이, 캐소드 집전체(202)는 알루미늄 호일일 수 있고, 캐소드 활성 물질(204)은 리튬 화합물일 수 있고, 애노드 집전체(210)는 구리 호일일 수 있고, 애노드 활성 물질(208)은 탄소일 수 있고, 분리막(206)은 전도성 중합체 전해질을 포함할 수 있다.

[0060] iv. 리튬 금속 폴리염이온(LMX) 화합물

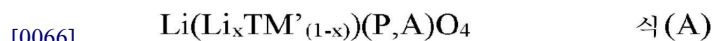
[0061] 본 기술은 기존 LFP보다 중량측정 에너지 밀도를 증가시키는 LMX 화합물의 화학양론을 식별하는 데 도움이 된다. 다양한 측면에서, 리튬 함량을 증가시키면 용량이 증가하고, 안정성이 개선되며, 중량측정 에너지 밀도가 증가될 수 있다.

[0062] 일부 측면에서, LMX 화합물의 화학양론에는 $Li/(Fe + TM) > 1$ (즉, Li 대 Fe 및 TM의 합의 비율이 1보다 높음)인 화합물이 포함되고, 적절한 전이 금속'(TM')의 선택 및/또는 음이온 PO_4 에서 P를 부분 치환하여 그의 산화 상태를 낮추고 산화환원 활성을 만드는 것에 의해 전하는 추가 Li를 보상하며, 여기서 TM은 치환 양이온 도펀트 또는 도펀트들을 나타낸다. 이는 최대 1.05의 과잉 $Li/(Fe+Mn+D)$ 를 가지고, $0.35 \leq Mn \leq 0.60$ 이며, 도펀트 D가 $0.001 \leq D \leq 0.1$ 인 화합물을 설명하는, 미국 특허 제9,178,215호의 화합물과는 상이하다. 다시 말해, 미국 특허 제9,178,215호는 Fe, Mn, 및 D의 합에 대한 Li의 비율이 최대 1.05인 화합물을 설명하는 한편, Mn의 양은 금속의 35-60% 범위 내에 있고, 도펀트의 양은 0.1%-1.0% 범위 내에 있다.

[0063] Mn의 다중 산화환원(예로서, $Mn^{2+}/^{3+}$ 및 $Mn^{3+}/^{4+}$)은 보다 높은 GED를 초래할 수 있다. 더 구체적으로, Mn의 보다 넓은 산화 상태 범위에 대해 접근함으로써 보다 높은 GED를 초래하는 추가 전자를 제공할 수 있다. 본 기술은 대략 0.3몰의 Mg를 도핑하면 올리빈형 캐소드 물질 내에서 Mn^{3+}/Mn^{4+} 산화환원을 활용하는 데 도움이 될 수 있음을 보여준다. 화합물은 과잉 리튬을 가질 필요가 없다.

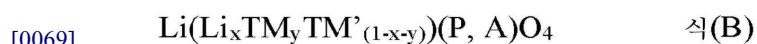
[0064] 일부 측면에서, 교환가능한 Li^+ 함량은 Fe^{2+} 자리에 Li^+ 를 첨가함으로써 증가된다. 이는 Fe^{2+} 의 일부를 여러 개의 보다 높은 산화 상태일 수도 있는 보다 높은 산화 상태의 전이 금속으로 대체함으로써 전하 보상된다.

[0065] Fe 자리에 Li^+ 가 첨가되고 전하는 음이온 PO_4^{3-} 의 평균 산화 상태를 $(P, A)O_4^{(-3+x)}$ 로 낮춤으로써 보상되어, 다음과 같이 식 (A)로 표시되는 화합물이 생성된다:



[0067] Li 외에도, x 양 더 많은 Li^+ 가 전이 금속 자리에 첨가되어 Li, Li_x , 및 TM'_{1-x} 의 전체 전하가 음이온에 대해 전하 균형화하며, 여기서 TM'은 Fe 및 Mn의 조합을 나타낸다. 음이온 $(P, A)O_4$ 는 A의 존재로 인해 산화환원 활성으로 추가 Li^+ 의 교환을 허용하며, 여기서 A는 실리콘(Si), 바나듐(V), 및 텅스텐(W) 등일 수 있다.

[0068] 일부 측면에서, 화합물은 식 (B)에 따라 Fe를 다른 전이 금속으로 치환하는 것을 포함하도록 일반화될 수 있다:



[0070] 여기서 $Li_xTM_yTM'_{(1-x-y)}$ 는 $LiFePO_4$ 의 Fe^{2+} 자리에 있는 원소이고, y는 TM의 분율을 나타내고, x는 과잉 Li의 분율을 나타내고, $0.1 \leq x$, $0 \leq y < 1$, $Li/(TM'+TM) > 1$ 이다. x, y, 및 z는 원자 백분율 또는 몰 분율을 나타낸다. 여기서 TM은 Mn, Mg, Zn, Co, V, Al, Ti, Zr, Mo, Cr, 또는 기타 전이 금속으로부터 선택되는 하나 이상의 원소이고, TM'은 Fe 및 Mn의 조합을 나타낸다. 전이 금속은 보다 양성적인 산화 상태로 산화됨으로써 탈리튬화 동안 전하를 균형화한다.

[0071] 일 구현예에서, $x = 0.2$, $y = 0.1$, $M = Ti$ 이고, 식 (B)는 $Li[Li]_{0.2}Fe_{0.2}Mn_{0.5}Ti_{0.1}PO_4$ 가 되고, 여기서 [Li]는

LiFePO₄의 Fe²⁺ 자리에 있는 Li⁺를 나타낸다. 여기서, 티타늄(Ti)은 순수한 물질의 전하 중성을 위해 +4 상태에 있다.

[0072] 또 다른 구현예에서, $x = 0.1$, $y = 0.1$, $M = Mo$ 이고, 식 (B)는 Li[Li]_{0.1}Fe_{0.8}Mo_{0.1}PO₄가 되고, 여기서 [Li]는 Fe²⁺ 자리에 있는 Li⁺를 나타낸다. 여기서, 몰리브덴(Mo)은 +3 산화 상태에 있으며, 모든 Li⁺를 활용하기 위해 +6으로 스윙한다. 평균 전압은 또한 Mo³⁺에서 Mo⁶⁺로의 보다 높은 전압으로 인해 증가한다.

[0073] 또 다른 구현예에서, $x = 0.1$, $y = 0.1$, $M = V$ 이고, 식 (B)는 Li[Li]_{0.1}Fe_{0.8}V_{0.1}PO₄가 되고, 여기서 [Li]는 Fe²⁺ 자리에 있는 Li⁺를 나타내고, 바나듐(V)은 +3 산화 상태에 있으며, 모든 Li⁺를 활용하기 위해 +5로 스윙할 수 있다. 화합물의 평균 전압은 또한 V³⁺에서 V⁵⁺로의 보다 높은 전압으로 인해 증가한다.

[0074] 일부 측면에서, 화합물 조성은 다음과 같이 식 (C)로 표시된다:

[0075] $Li[Li_{1-x-y-z}Fe_xMn_yTM_z](P,A)O_4$ 식 (C)

[0076] 여기서 x는 Fe의 분율을 나타내고, y는 Mn의 분율을 나타내고, z는 Li에 대한 TM의 분율을 나타내고, $0 \leq x \leq 1$, $0 \leq y \leq 0.8$, $0 \leq z \leq 0.6$ 이고, 전이 금속(TM)은 Mg, Zn, Co, V, Al, Ti, Zr, Mo, 또는 Cr 중 하나 이상을 포함한다. 일 구현예에서, $x=0$, $y=0.8$, 및 $z=0.2$ 이고, 식 (C)는 Li[Mn_{0.8}Mg_{0.2}]PO₄가 된다. 0.8의 Mn은 Mn²⁺를 Mn³⁺로 산화시킴으로써 탈리튬화 동안 전하를 균형화할 수 있다. Mn³⁺에서 Mn⁴⁺로의 추가 (부분적) 산화는 탈리튬화 동안 남은 0.2 Li를 활용한다.

[0077] 일부 변형예에서, $0 \leq x \leq 1.0$ 이다. 일부 변형예에서, $0 \leq x \leq 0.9$ 이다. 일부 변형예에서, $0 \leq x \leq 0.8$ 이다. 일부 변형예에서, $0 \leq x \leq 0.7$ 이다. 일부 변형예에서, $0 \leq x \leq 0.6$ 이다. 일부 변형예에서, $0 \leq x \leq 0.5$ 이다. 일부 변형예에서, $0 \leq x \leq 0.4$ 이다. 일부 변형예에서, $0 \leq x \leq 0.3$ 이다. 일부 변형예에서, $0 \leq x \leq 0.2$ 이다. 일부 변형예에서, $0 \leq x \leq 0.1$ 이다.

[0078] 일부 변형예에서, $0 \leq y \leq 0.8$ 이다. 일부 변형예에서, $0 \leq y \leq 0.7$ 이다. 일부 변형예에서, $0 \leq y \leq 0.6$ 이다. 일부 변형예에서, $0 \leq y \leq 0.5$ 이다. 일부 변형예에서, $0 \leq y \leq 0.4$ 이다. 일부 변형예에서, $0 \leq y \leq 0.3$ 이다. 일부 변형예에서, $0 \leq y \leq 0.2$ 이다. 일부 변형예에서, $0 \leq y \leq 0.1$ 이다.

[0079] 일부 변형예에서, $0 \leq z \leq 0.6$ 이다. 일부 변형예에서, $0 \leq z \leq 0.5$ 이다. 일부 변형예에서, $0 \leq z \leq 0.4$ 이다. 일부 변형예에서, $0 \leq z \leq 0.3$ 이다. 일부 변형예에서, $0 \leq z \leq 0.2$ 이다. 일부 변형예에서, $0 \leq z \leq 0.1$ 이다.

[0080] 상기 Li[Mn_{0.8}Mg_{0.2}]PO₄ 화합물을 추가 Li 및 V과 조합함으로써, 식 Li[Li_{0.1}Mn_{0.6}Mg_{0.2}V_{0.1}]PO₄를 갖는 캐소드 물질이 형성될 수 있다. 다시 말해, 식 (C)와 관련하여, $x = 0$, $y = 0.6$, $TM = Mg, V$, 및 $z = 0.3$ (즉, 전이 금속 Mg 및 V의 백분율의 합, 0.2+0.1)이다.

[0081] v. 과잉 Li이 없는 올리빈형 캐소드 물질

[0082] 본 기술은 또한 과잉 Li을 도입하지 않고도 GED를 개선한다. 과잉 리튬은 종종 추가 용량을 제공하는 데 사용된다. 따라서, 과잉 리튬을 제거하면 에너지 용량이 낮아진다. 그러나, 본 기술은 추가 전이 금속을 활용하여 과잉 리튬을 제거하는 데 따른 한계를 해결한다. 더 구체적으로, 올리빈형 캐소드 물질은 LiMPO₄(M=Fe 및 Mn)를 포함할 수 있다. Mn을 전이 금속으로서 활용하면 Mn^{2+/3+} 및 Mn^{3+/4+} 산화환원 반응을 모두 사용하여 추가 용량을 제공할 수 있다.

[0083] 일부 측면에서, Mn의 다중 산화환원은 Mn^{2+/3+} 및 Mn^{3+/4+} 산화환원과 같이, 올리빈형 캐소드 물질에서 활용될 수 있다. 올리빈형 캐소드 물질은 다음과 같이 식 (D)로 표시된다:

[0084] $Li[Fe_{1-x-y}Mn_xTM_y](P,A)O_4$ 식 (D)

[0085] 여기서 $0.15 < x < 0.45$, $0.20 < y < 0.45$ 이고, 여기서 TM은 Mn, Mg, Zn, Ca, Ni, Co, V, Al, Ti, Zr, Mo, Cr 등에서 선택되는 적어도 하나의 원소이고, x는 Mn의 분율을 나타내고, y는 TM의 분율을 나타낸다.

- [0086] 일부 변형예에서, $0.15 < x < 0.45$ 이다. 일부 변형예에서, $0.20 < x < 0.45$ 이다. 일부 변형예에서, $0.25 < x < 0.45$ 이다. 일부 변형예에서, $0.30 < x < 0.45$ 이다. 일부 변형예에서, $0.35 < x < 0.45$ 이다. 일부 변형예에서, $0.40 < x < 0.45$ 이다. 일부 변형예에서, $0.15 < x < 0.40$ 이다. 일부 변형예에서, $0.15 < x < 0.35$ 이다. 일부 변형예에서, $0.15 < x < 0.30$ 이다. 일부 변형예에서, $0.15 < x < 0.25$ 이다. 일부 변형예에서, $0.15 < x < 0.20$ 이다.
- [0087] 일부 변형예에서, $0.25 < x < 0.35$ 이다. 일부 변형예에서, $0.20 < x < 0.35$ 이다. 일부 변형예에서, $0.20 < x < 0.30$ 이다. 일부 변형예에서, $0.15 < x < 0.30$ 이다. 일부 변형예에서, $0.15 < x < 0.25$ 이다. 일부 변형예에서, $0.10 < x < 0.35$ 이다. 일부 변형예에서, $0.10 < x < 0.30$ 이다. 일부 변형예에서, $0.10 < x < 0.25$ 이다. 일부 변형예에서, $0.10 < x < 0.20$ 이다. 일부 변형예에서, $0.10 < x < 0.15$ 이다.
- [0088] 일부 변형예에서, $0.20 < y < 0.45$ 이다. 일부 변형예에서, $0.20 < y < 0.40$ 이다. 일부 변형예에서, $0.20 < y < 0.35$ 이다. 일부 변형예에서, $0.20 < y < 0.30$ 이다. 일부 변형예에서, $0.20 < y < 0.25$ 이다. 일부 변형예에서, $0.25 < y < 0.45$ 이다. 일부 변형예에서, $0.30 < y < 0.45$ 이다. 일부 변형예에서, $0.35 < y < 0.45$ 이다. 일부 변형예에서, $0.40 < y < 0.45$ 이다.
- [0089] 일부 변형예에서, $0.25 < y < 0.35$ 이다. 일부 변형예에서, $0.20 < y < 0.35$ 이다. 일부 변형예에서, $0.20 < y < 0.30$ 이다. 일부 변형예에서, $0.15 < y < 0.30$ 이다. 일부 변형예에서, $0.15 < y < 0.25$ 이다. 일부 변형예에서, $0.10 < y < 0.35$ 이다. 일부 변형예에서, $0.10 < y < 0.30$ 이다. 일부 변형예에서, $0.10 < y < 0.25$ 이다. 일부 변형예에서, $0.10 < y < 0.20$ 이다. 일부 변형예에서, $0.10 < y < 0.15$ 이다.
- [0090] 실험은 식 (D)로 표시되는 높은 중량측정 에너지 밀도(GED) 올리빈 화합물의 성공적인 합성을 입증하였다.
- [0091] 일 구현예에서, $x = 0.3$ 및 $y = 0.3$, $TM = Mg$ 이고, 식 (D)는 $Li[Fe_{0.4}Mn_{0.3}Mg_{0.3}]PO_4$ 가 된다. Mg의 분율은 통상적 범위인 $0.2 > y > 0$ 을 벗어난다.
- [0092] 이 $Li[Fe_{0.4}Mn_{0.3}Mg_{0.3}]PO_4$ 화합물은 성공적으로 합성되었다. 합성은 충전 및 방전 도중에 $Mn^{3+/4+}$ 산화환원을 활용한다. $Mn^{3+/4+}$ 는 약 4.1V의 산화환원 전압을 갖는 $Mn^{2+/3+}$ 보다 높은 산화환원 전압을 갖는다. $Mn^{3+/4+}$ 는 또한 약 3.45V의 산화환원 전압을 갖는 $Fe^{2+/3+}$ 보다 높은 산화환원 전압을 갖는다. 따라서, $Mn^{3+/4+}$ 산화환원에 대한 접근은 GED를 증가시키고 과잉 리튬 제거로 인해 감소된 용량을 상쇄한다.
- [0093] 또한, $Li[Fe_{0.4}Mn_{0.3}Mg_{0.3}]PO_4$ 화합물에서 대략 0.3몰의 Mg으로 물질을 도핑하면 올리빈형 캐소드 물질 내에서 $Mn^{3+/4+}$ 산화환원을 활용하는 데 도움이 될 수 있다. 또한, $Li[Fe_{0.4}Mn_{0.3}Mg_{0.3}]PO_4$ 화합물은 X선 회절(XRD) 분석에서 $LiFePO_4$ 와 유사한 XRD 패턴을 보였다.
- [0094] **vi. LMX 캐소드 활성 물질의 기계 학습 지원 최적화**
- [0095] 최적의 캐소드를 달성하기 위해 시험할 수 있는 가능한 변형은 수천에서 수만 가지가 있으며, 각 변형은 합성하고 시험하는 데 자원 집약적이고, 비용이 많이 들고, 시간이 많이 소요된다. 예를 들어, 설계 공간에서 조정해야 하는 이러한 변수는 최소한 다음을 포함한다: (1) Li 과잉(x), (2) 치환 양이온 도펀트(M)의 특성, (3) M의 양(y), (4) 치환 폴리음이온 도펀트(A)의 특성, (5) A의 양(z), (6) 합성 온도 T1, (7) 온도 T1에서의 합성 체류 시간, (8) 합성 온도 T2, (9) 온도 T2에서의 합성 체류 시간.
- [0096] 일부 변형예에서, Mg 또는 Zn 등과 같은 하나 이상의 도핑 원소를 보다 많은 양으로 화합물에 첨가하여 높은 GED를 얻을 수 있다.
- [0097] 변수 및 관심 있는 지표(예컨대 캐소드의 전기화학적 성능, 입자 크기, 탭 밀도, 상 순도 등) 사이에 분석적 관계가 없다. 목표는 변수에 대한 매개변수 집합에 대한 관심있는 지표로 측정시 개연성있는 결과를 결정하는 것이다.
- [0098] 능동 학습은 변수에 대한 입력(설계 변수)으로부터 관심있는 지표로 정량화된 출력으로 맵핑하는 모델을 구축하기 위해 효율적이고 간결한(parsimonious) 데이터 수집을 안내하는 기계 학습 모델의 부류를 말한다. 특정 구현에는 탐색 및 활용 전략의 균형을 맞추기 위한 베이지안 최적화가 포함된다. 베이지안 최적화의 두 가지 구성요소는 1) 모델 함수 및 2) 획득 함수이다.
- [0099] 모델 함수의 경우, 확률적 기반 및 공분산 함수에 대한 물리적 기반의 커널을 인코딩하는 기능 때문에 가우시안 프로세스가 사용될 것이다.

- [0100] 베이지안 최적화의 목표는 관찰 집합을 사용하고 다음에 실험을 평가할 위치를 제안하는 것이다. 획득 함수는 일반적으로 x 에서 f 를 평가하는 것이 최소화 문제에서 얼마나 바람직한 것으로 기대되는지 여부에 정합하는 주어진 지점에서 평가될 수 있는 저비용 함수이다. 획득 함수는 다음 관찰 위치를 선택하도록 최적화할 수 있다. 최적화 문제의 맥락에서 손실 함수로서 해석될 수도 있다. 획득 함수의 일반적인 선택에는 확률적 개선, 기대 개선, 상한 신뢰 구간 등이 포함된다. 기대 개선과 같은 특정 획득 함수는 실험의 목표가 설계 공간을 "탐색"하는 연구 설정에 더 적절한 반면, "상한 신뢰 구간" 획득 함수는 보다 개발적인 설정에서와 같이 전역 최대화(또는 최소화)에 더 적합하다.
- [0101] 획득 함수는 상한 신뢰 구간, 기대 개선 중 하나일 수 있거나, 정보 이득이 사용될 수 있다. 실험 캠페인의 의도(연구 대 개발)에 따라 탐색 및 활용 간에 상충 관계가 있다. 또한, 최적화는 배치 설정에서 수행될 수 있으며, 이는 각 이터레이션에서, 사용가능한 자원의 제약 조건에 따라 여러 데이터 포인트를 병렬로 수집할 수 있음을 의미한다.
- [0102] 예를 들어, 중량측정 에너지 밀도를 증가시키기 위한 실험 캠페인의 작업흐름도는 다음과 같을 수 있다:
- [0103] 단계 1: 위에서 언급한 설계 공간에서 변수로부터 N 개의 변형을 합성하고 분말 사양 및 코인 셀 전기화학 데이터를 평가한다. 변형은 상기 설계 공간에서 변수에 대한 값의 벡터로서 정의된다. 이는 모델을 훈련하기 위한 시드 데이터 역할을 한다.
- [0104] 단계 2: 분말 수준 지표가 속해야 하는 세트 사양의 제약 조건에 따라 코인 셀 에너지 밀도를 출력으로서 사용하여 가우시안 프로세스 모델을 적합한다.
- [0105] 단계 3: 획득 함수를 사용하여, 에너지 밀도를 증가시킬 가능성이 있거나 그러할 것으로 예측되는, 다음 이터레이션에서 평가할 N 개의 변형[N 은 변경될 수 있음]을 결정한다.
- [0106] 단계 4: 단계 3의 N 개의 변형을 합성하고 분말 사양 및 코인 셀 전기화학 데이터를 평가한다.
- [0107] 단계 5: 실험 예산이 소진되거나, 연속적 이터레이션의 차이가 임계값 아래로 떨어지거나, 또는 이터레이션이 표적 중량측정 에너지 밀도(GED)에 대한 사양의 집합을 충족할 때까지 단계 2-4를 반복한다.
- [0108] 캐소드 개발에는 상충 관계가 포함된다. 알고리즘은 용량 비율, 저항, 탭 밀도, 및 기타 양을 심각하게 손상시키지 않고 중량측정 에너지 밀도를 증가시키는 설계 변수의 파레토 최적 선택을 제공할 수 있다. 알고리즘은 노이즈가 있는 데이터 및 범주형 변수와 함께 작동할 수도 있다.
- [0109] 캐소드 개발은 실험과 기계 학습을 조합하여 표적 중량측정 에너지 밀도(GED)를 달성하기 위한 특정 과잉 Li 범위를 연구하는 데 사용된다.
- [0110] 과잉 Li를 사용하여 GED를 증가시키는 경우, 다른 특성이 악화되거나 손상될 수 있다. 기계 학습은 적절한 상충 관계를 발견하는 데 도움이 될 수 있다. 예를 들어, 기계 학습 예측은 수명 주기, 용량, 전압, 에너지 유지율, 안정성 등이 어떻게 영향을 받을지 발견하는 데 도움이 될 수 있다. 최적화는 GED를 증가시키고 다른 요인 중에서도 수송 특성(전도도, 표면 반응 운동성, Li^+ 확산 속도 등), 및 사이클 수명을 손상시키지 않으려는 시도를 포함하는 다목적이다. 최적화는 파레토 최적이 되고 상충 관계를 발견할 것이다. 다른 모든 지표도 측정될 수 있으며 실험에 정보를 제공하는 데 사용될 수 있다. 예를 들어, GED를 최대화하기 위해, 제약 조건에는 전압을 4.1V 미만으로 유지하고, 여전히 풍부한 원소를 활용(예로서, 재료 비용 절감을 위함)하는 한편, 동일하거나 개선된 수송 특성을 얻는 목표를 갖는 것이 포함될 수 있다.
- [0111] 기계 학습은 표적 GED에 도달하기 위해 실행할 실험 수를 줄이는 데 도움이 될 수 있다. 설정된 상충 관계를 달성하기 위해 실행할 실험 수의 측면에서 효율성이 획득될 것이다. 각 실험 세트는 이전 실험 및 데이터에 대한 정보를 받을 것이다. 설계가 정적(즉, 실행할 실험이 사전 설정됨)인 기존 실험 설계와 비교할 때, 베이지안 최적화 및/또는 능동 학습 접근법은 동적으로 데이터 수집을 결정하고 모든 증분 데이터 수집으로 반응 표면의 모델을 구축한다. 이를 통해 최신 정보를 사용하여 추가 실험의 과정을 결정할 수 있다.
- [0112] **vii. 셀 개발을 위한 작업흐름도**
- [0113] 도 3은 본 발명의 구현예에 따른 분말 및 셀 수준에서 캐소드 합성 및 자격부여를 위한 단계를 설명하는 작업흐름도이다. 예를 들어, 작업흐름도(300)는 배터리 셀을 형성하기 위해 제공된다. 작업흐름도 또는 프로세스(300)에는 (1) 합성, (2) 분말 계측, (3) 셀 프로토타입 제작, 및 (4) 셀 시험이 포함된다.
- [0114] 합성은 캐소드 분말을 형성하는 공정이다. 도 3에 도시된 바와 같이, 합성에는 전구체를 혼합하는 것이 포함되

며, 이는 Li:Fe 또는 Li:Mn 또는 도펀트 화학양론 화학과 관련이 있다. 합성에는 또한 습식 또는 건식 조건 하에서 밀링하는 것이 포함된다. 합성에는 또한 다양한 온도 및 시간에서의 소성이 포함된다. 합성에는 또한 표면 처리가 포함되며, 이는 또한 화학과 관련이 있다.

- [0115] 이후 전구체 물질(예로서, 리튬 염, 포스페이트, 실리카)은 습식 실험실에서 화학 반응을 거쳐 분말(예로서, LMX)을 합성할 수 있다. 분말을 합성하는 하나의 방법은 고체 상태 합성을 포함한다. 고체 상태 합성은 생산 증가를 위해 쉽게 확장될 수 있는 연속적인 공정을 제공한다. 고체 상태 합성의 경우, 전구체 물질은 밀링 단계 동안 반응하지 않는다. 따라서, 분말은 밀링 후에 혼합되어야 한다.
- [0116] 밀링 공정의 결과는 전구체가 작은 크기(예로서, 서브미크론)로 밀링될 수 있는 슬러리이다. 여러 다른 밀을 사용하여 분말을 슬러리로 밀링할 수 있다. 예를 들어, 수평 디스크 밀을 사용하여 분말을 서브미크론 크기로 밀링할 수 있다. 또 다른 예로서, 유성 볼 밀을 사용하여 분말을 슬러리로 밀링할 수 있다. 일부 상황에서, 유성 볼 밀이 더 바람직할 수 있는데, 유성 볼 밀은 별도의 병에 있는 여러 다른 조성물 또는 분말을 처리하도록 구성될 수 있기 때문이다. 다시 말해서, 유성 볼 밀은 여러 다른 조성물을 동시에 밀링하여 처리량을 개선할 수 있다. 유성 볼 밀의 한 가지 단점은 유성 볼 밀이 밀링 중에 원하지 않는 기체를 생성하기 때문에 온도 및 기체에 대한 추가 모니터링이 필요할 수 있다는 것이다.
- [0117] 일부 상황에서, 물이 밀링 용매로서 사용될 수 있다. 다른 상황에서, 물질이 물과 호환되지 않을 수 있는 경우 알코올 또는 다른 밀링 용매가 사용될 수 있다.
- [0118] 다른 합성 방법(예로서, 수열 합성, 용매열 합성, 마이크로파 수열 합성 등)은 고체 상태 합성을 보완할 수 있다. 이러한 다양한 합성 방법은 합성 공정 중에 용매에 물질이 용해되기 때문에 밀링의 필요성을 줄일 수 있다. 예를 들어, 수열 합성은 보다 균질한 분말을 제공할 수 있다. 수열 합성에서, 전구체 물질은 용매(예로서, 물 또는 알코올 등)에 용해되어 오토클레이브에 놓이는 용액을 형성한다. 이후 챔버를 밀봉하고, 고온(예로서, 200 °C)으로 가열하고, 고압(예로서, 300 Psi)로 가압한다. 결과적으로, 전구체 물질의 반응은 작은 챔버 내부의 고열 및 고압 하에 용액 중에서 일어난다. 반응 후(예로서, 24시간 후), 분말의 작은 결정 또는 작은 입자(예로서, LMX)가 남는다. 수열 합성은 느린 배치 공정이며 확장하기가 더 어렵다. 예를 들어, 일반적인 수열 합성은 물질을 가열하고 합성을 완료하는 데 최대 하루가 걸릴 수 있다.
- [0119] 또 다른 예로서, 마이크로파 수열 및/또는 마이크로파 용매열 합성은 마이크로파를 활용하여 물질을 빠르게 가열하고 합성을 완료할 수 있다(예로서, 20분). 마이크로파 보조 합성은 작은 배치 크기를 창출하며 생산 또는 처리량 증가를 위해 확장하기 어렵다.
- [0120] 일부 경우에, 이러한 방법에 "원포트" 합성이 포함될 수 있다. 원포트 합성은 모든 원료를 하나의 포트에 합치고 여기서 반응이 발생하는 편리한 합성 방법을 제공할 수 있다. 따라서, "원포트" 합성은 추가적인 전구체 반응, 혼합, 및 기타 단계 없이 단순화된 공정을 제공할 수 있다. 원포트 합성 기술의 한 가지 단점은 적절한 제어 또는 예방 조치 없이 원하지 않는 반응이 발생할 수 있기 때문에 이러한 기술을 제어하기가 더 어렵다는 것이다.
- [0121] 습식 밀링의 경우, 분말을 슬러리로 밀링한 후, 슬러리를 예를 들어 분무 건조에 의해 건조한다. 일부 상황에서, 건조 방법에 따라 생성된 분말의 특성이 상이할 수 있다. 예를 들어, 노즐, 압력, 온도, 생산 챔버 등을 변경하면 모양, 구형 크기 등과 같은 분말의 특성이 달라질 수 있다. 일부 경우에, 질소 기체를 사용하여 습기에 민감할 수 있는 물질을 분무할 수 있다. 물질을 건조하는 또 다른 방법은 진공 오븐 및/또는 마이크로파 오븐을 활용하는 것이다.
- [0122] 캐소드 분말을 건조한 후, 캐소드 분말은 휘발성 물질을 제거하기 위해 상승된 온도로 가열함으로써 소성된다. 박스형 퍼니스 및/또는 튜브형 퍼니스를 사용하여 캐소드 분말을 소성할 수 있다. 소성에는 온도, 지속 시간, 물질 층, 스택 높이, 퍼니스에서 사용되는 기체, 가열 프로파일, 압력 등을 포함한 다양한 구성가능한 매개변수가 포함될 수 있다.
- [0123] 일부 경우에, 캐소드 분말에 처리를 가하여 전기 전도도가 개선될 수 있다. 탄소 코팅은 리튬 이온 배터리에서 캐소드 활성 물질의 전도도를 개선하는 데 일반적으로 사용되는 기술이다. 탄소 코팅은 다른 고유 특성을 변경하지 않고 캐소드 활성 물질의 전기 전도도를 개선할 수 있다. 캐소드 활성 물질 또는 화합물에 탄소를 균일하게 코팅하면 전하 응집 및 바람직하지 않은 화학 반응을 방지하는 데 도움이 된다. 캐소드 활성 물질 또는 화합물(예로서, LMX) 상의 탄소 코팅은 탄소 코팅된 캐소드 분말로부터 생성된 배터리 셀의 사이클링 성능에 영향을 미칠 수 있다.

- [0124] 일부 변형예에서, 입자는 탄소 코팅으로 코팅될 수 있다. 탄소 코팅을 형성하는 한 가지 방법은 물 기반인 슬러리에 가용성 당(예로서, 포도당)을 넣는 것이다. 분무 건조 후, 당은 분무 건조된 분말에 존재한다. 소성하는 동안, 당은 분해되어 각 입자 주위에 탄소 코팅을 형성한다.
- [0125] 분말 계측에는 생성된 합성된 분말의 물질 특성화 및 분석을 수행하여 캐소드 분말이 다음 단계(예로서, 셀 프로토타입 제작 또는 캐소드 분말을 사용한 배터리 셀 구축)에 적합한지 여부를 결정하는 것이 포함된다. 캐소드 분말의 물질 특성화 및 분석은 상 순도, 결정성, 입자 크기, 캐소드 입자의 표면적, 및 탭 밀도 등과 같은 캐소드 분말의 하나 이상의 특징 및/또는 특성을 결정하기 위해 수행된다. 일부 구현예에서, 분말 계측은 자동으로 수행될 수 있으며, 분말 계측의 결과는 분말의 제조를 위한 전구체 물질 및 공정 매개변수를 식별하는 데 사용되는 기계 학습 모델로 피드백될 수 있다.
- [0126] 캐소드 입자의 상 순도, 결정성, 입자 크기, 및 표면적은 X선 회절 분석(XRD), 주사 전자 현미경(SEM), 에너지 분산 X선 분광법(EDS) 등을 포함한 물질 분석 공정(예로서, 다양한 분석 장비로 용이해짐)에 의해 결정될 수 있다.
- [0127] 예를 들어, 하나의 탭 밀도는 관심있는 물질 특성 중 하나이다. 탭 밀도는 입자 사이의 기공 및 공극을 고려하는데, 이는 느슨한 분말 베드가 아니라 정의된 수의 탭핑 단계 후의 베드에 기반한다. 캐소드 분말의 탭 밀도는 분말 베드의 정의된 탭핑 단계 후에 결정된다. 탭 밀도는 느슨한 분말 베드의 기공 및 공극을 고려하는 분말의 벌크 밀도와 다르다. 분말을 측정 실린더에 느슨하게 붓는 경우 벌크 밀도가 결정될 수 있다.
- [0128] 도 3에서 추가로 설명된 바와 같이, 작업흐름도(300)에는 배터리 셀을 구축하는 것과 같은 셀 프로토타입 제작도 포함된다. 구체적으로, 셀 프로토타입 제작은 전극 제조, 셀 조립, 및 코인 셀과 같은 배터리 셀의 포메이션을 포함한다. 셀 프로토타입이 형성된 후, 배터리 셀이 배터리 셀의 표적 셀 특성을 충족하는지 확인하기 위해 셀을 시험할 수 있다(즉, 셀 시험). 일부 표적 셀 특성에는 내부 저항, 전압, 용량, 및 사이클 수명 등이 포함된다.
- [0129] 예를 들어, 하나의 표적 셀 특성은 배터리 또는 배터리 셀의 용량으로, 이는 배터리에 저장된 전하를 측정한 것이며 배터리에 함유된 활성 물질의 질량에 의해 결정된다. 용량은 특정 지정 조건 하에서 배터리에서 추출할 수 있는 최대 전하량을 나타낸다. 배터리는 시간 경과에 따라 전달될 수 있는 암페어 단위의 방전 전류를 갖는다. 배터리 용량은 암페어-시간(Ah)으로 표시된다.
- [0130] **viii. XRD 결과**
- [0131] X선 회절 분석(XRD)은 재료 과학에서 결정 구조, 화학적 구성, 및 기타 물리적 특성과 같은 물질의 일부 특성을 결정하는 데 사용되는 분석 기술이다. XRD는 단색 X선 및 결정질 샘플의 보강 간섭을 기반으로 한다. X선은 충분한 에너지를 가진 전기적으로 하전된 입자가 감속될 때 생성되는 보다 짧은 파장의 전자기 복사선이다. XRD에서, 생성된 X선은 콜리메이트되어(즉, 평행하게 만듦) 물질 샘플로 향하고, 여기서 입사 광선과 샘플의 상호작용으로 회절 선이 생성되고, 이후 회절 선은 감지, 처리, 및 계수된다. 물질의 다른 각도에서 산란된 회절 선의 강도는 회절 패턴을 표시하기 위해 플롯된다.
- [0132] 도 4는 개시된 기술의 일부 측면에 따른 LiFePO_4 화합물 및 $\text{Li}[\text{Fe}_{0.4}\text{Mn}_{0.3}\text{Mg}_{0.3}]\text{PO}_4$ 화합물의 X선 회절(XRD) 패턴을 도시한다. 수평 축 또는 x-축은 2-세타 각도를 나타내는 반면, 수직 축 또는 y-축은 임의의 강도 또는 총수를 나타낸다. 2-세타 각도는 입사 X선 빔으로부터 검출기 위치의 각도에 대한 것으로 사용된다. 도 4에 도시된 바와 같이, XRD 패턴(402)은 LiFePO_4 화합물에 대한 XRD 결과를 나타내는 반면, XRD 패턴(404)은 $\text{Li}[\text{Fe}_{0.4}\text{Mn}_{0.3}\text{Mg}_{0.3}]\text{PO}_4$ 화합물에 대한 XRD 결과를 나타낸다.
- [0133] 도 4는 $\text{Li}[\text{Fe}_{0.4}\text{Mn}_{0.3}\text{Mg}_{0.3}]\text{PO}_4$ 화합물의 XRD 패턴(404)이 LiFePO_4 화합물의 XRD 패턴(402)과 중첩되거나 중복되는 것을 보여주며, 이는 $\text{Li}[\text{Fe}_{0.4}\text{Mn}_{0.3}\text{Mg}_{0.3}]\text{PO}_4$ 화합물이 LiFePO_4 화합물과 유사한 피크를 갖는다는 것을 나타낸다. 따라서, XRD 분석은 $\text{Li}[\text{Fe}_{0.4}\text{Mn}_{0.3}\text{Mg}_{0.3}]\text{PO}_4$ 화합물이 LiFePO_4 와 동일하거나 실질적으로 유사한 구조를 갖는다는 것을 보여준다. XRD 분석은 또한 XRD 분석에 근거하여 $\text{Li}[\text{Fe}_{0.4}\text{Mn}_{0.3}\text{Mg}_{0.3}]\text{PO}_4$ 화합물이 임의의 부산물 또는 불순물이 없는 단일 상을 갖는다는 것을 보여준다.
- [0134] **ix. 셀 시험 및 실험 결과**
- [0135] 캐소드 디스크는 합성된 분말로부터 형성된다. 캐소드 디스크의 밀도는 분말의 크기에 따라 달라진다. 더 구체

적으로, 분말의 크기를 감소시키면 캐소드 디스크의 밀도를 증가시킬 수 있다. 이러한 목적을 위해 분말을 보다 미세한 분말로 분쇄하는 데 밀이 종종 사용된다.

- [0136] 다공성은 물질의 공극 공간을 측정하는 것이다. 캐소드의 다공성은 전기화학적 셀의 성능에 영향을 미칠 수 있다. 예를 들어, 캐소드 디스크는 $\text{Li}[\text{Fe}_{0.4}\text{Mn}_{0.3}\text{Mg}_{0.3}]\text{PO}_4$ 화합물을 포함하는 분말을 압축하여 형성될 수 있다.
- [0137] 캐소드 디스크는 애노드 디스크, 및 전해질을 사용하여 단추 또는 코인 셀 배터리로 조립된다. 따라서, 코인 셀은 $\text{Li}[\text{Fe}_{0.4}\text{Mn}_{0.3}\text{Mg}_{0.3}]\text{PO}_4$ 캐소드 디스크를 이용해 제조될 수 있다. 코인 셀은 용량, 평균 전압, 체적 에너지 밀도, 및 방전 에너지 유지율을 포함한 캐소드 물질의 다양한 특성을 결정하기 위해 평가된다. 셀 실험에는 코인 셀에 대해 수행되는 사이클링 시험이 포함될 수 있다. 코인 셀의 정전류 충전/방전 사이클링이 수행될 수 있다.
- [0138] 코인 셀은 배터리 시험기(예로서, Neware 또는 Arbin에서 제작)에 연결될 수 있는 온도 제어 챔버에 적재되고 사용자 맞춤형 시험 프로토콜에 따라 시험될 수 있다. 시험 온도는 약 10°C 내지 약 45°C 로 달라질 수 있다. 다양한 시험 프로토콜은 다양한 시험 전류(예로서, C/100 내지 1C), 다양한 전압 범위(예로서, 약 1.5V 내지 약 5V), 다양한 사이클 수(1 사이클 내지 50 사이클), 및 위의 모든 매개변수의 다양한 조합을 포함하여 코인 셀의 성능을 평가하도록 설계될 수 있다. 예를 들어, 코인 셀의 정전류 충전/방전 사이클은 약 30°C 에서 C/10의 속도로 2.5V 내지 5.2V 범위의 작동 전압으로 수행될 수 있다.
- [0139] 전기화학 시험기는 사용자에게 배터리 시험에서 다양한 옵션을 제공한다. 여러 채널을 전기화학 시험기에 연결하여 여러 배터리를 동시에 시험할 수 있다. 이러한 시험을 통해 사용자는 전압, 전류, 임피던스, 및 용량 등과 같은 배터리의 매개변수를 측정하여 시험 중인 전기화학적 셀의 효능을 충분히 이해할 수 있다. 시험기를 컴퓨터에 연결하여 디지털 시험 값을 취득할 수 있다.
- [0140] 다음 예는 설명 목적으로만 사용된다. 본 기술분야의 숙련된 기술자에게는 물질 및 방법 모두에 대한 많은 수정이 본 발명의 범위를 벗어나지 않고 실행될 수 있다는 것이 명백할 것이다.
- [0141] $\text{Li}[\text{Fe}_{0.4}\text{Mn}_{0.3}\text{Mg}_{0.3}]\text{PO}_4$ 화합물로부터 형성된 캐소드 물질로 제조된 코인 셀 배터리의 전기화학적 분석의 실험 결과는 높은 GED의 잠재력을 입증하였다.
- [0142] 도 5는 개시된 기술의 일부 측면에 따른 $\text{Li}[\text{Fe}_{0.4}\text{Mn}_{0.3}\text{Mg}_{0.3}]\text{PO}_4$ 화합물의 충전 및 방전 데이터를 보여준다. 수평 또는 x-축은 배터리의 비용량을 나타내고 수직 또는 y-축은 Li 금속 대비 배터리의 전압을 나타낸다. 작동 전압은 Li 대비 2.5V 내지 5.2V 범위이다. Li 금속 대비 전압은 캐소드 전압의 기준 전압이 Li 금속의 전압임을 의미한다.
- [0143] 도 5에 나타난 바와 같이, 곡선(502)은 방전을 나타내는 한편 곡선(504)은 충전을 나타낸다. 곡선(502)은 방전 동안 3개의 다른 영역(506A, 506B, 및 506C)을 포함한다. 첫 번째, 두 번째 및 세 번째 영역(506A, 506B, 506C)은 각각 Mn^{4+} 에서 Mn^{3+} 로의 환원, Mn^{3+} 에서 Mn^{2+} 로의 환원, 및 Fe^{3+} 에서 Fe^{2+} 로의 환원을 포함한 세 가지 다른 환원을 나타낸다.
- [0144] 첫 번째 영역(506A)(예로서, 0 내지 10 mAh/g 영역)에서 입증된 방전 시작 시, 잠재 에너지는 대략 5V에서 대략 4.2V로 떨어지며, 이는 $\text{Li}[\text{Fe}_{0.4}\text{Mn}_{0.3}\text{Mg}_{0.3}]\text{PO}_4$ 화합물에서 Mn^{4+} 에서 Mn^{3+} 로의 환원을 나타내는 것으로, 이를 $\text{Mn}^{3+/4+}$ 환원이라고도 지칭한다. 환원 전위는 Li 대비 약 4.8V이다.
- [0145] $\text{Mn}^{3+/4+}$ 환원 후, 두 번째 영역(506B)(예로서, 10 내지 60 mAh/g 영역)은 Mn^{3+} 에서 Mn^{2+} 로의 환원을 나타내며, 이는 $\text{Mn}^{2+/3+}$ 환원이라고도 지칭한다. 세 번째 영역(506C)(예로서, 60 내지 130 mAh/g 영역)은 Fe^{3+} 에서 Fe^{2+} 로의 환원을 나타내며, 이는 $\text{Fe}^{2+/3+}$ 환원이라고도 지칭한다.
- [0146] 도 6은 개시된 기술의 일부 측면에 따른 $\text{Li}[\text{Fe}_{0.4}\text{Mn}_{0.3}\text{Mg}_{0.3}]\text{PO}_4$, $\text{LiFe}_{0.6}\text{Mn}_{0.4}\text{PO}_4$, LiMnPO_4 , 및 LiFePO_4 화합물에 대한 충전 또는 방전 동안의 용량 대비 전압의 비교를 보여준다. 도시된 바와 같이, 충전 또는 방전 곡선(602, 604, 606, 및 608)은 각각 화합물 $\text{Li}_2[\text{Fe}_{0.4}\text{Mn}_{0.3}\text{Mg}_{0.3}]\text{PO}_4$, $\text{Li}_2\text{Fe}_{0.6}\text{Mn}_{0.4}\text{PO}_4$, Li_2MnPO_4 , 및 Li_2FePO_4 에 대한 충전 중 용량 대비 방전 전압을 나타내며, 여기서 하첨자 z는 충전 중 변수이다. 충전 시작 시 용량이 0인 경우, $z=1$ 인 반면, 충전 종료 시 용량이 170 mAh/g와 같이 가장 높은 값에 도달하는 경우 $z=0$ 이고, 4개 화합물 중 $\text{Li}[\text{Fe}_{0.4}\text{Mn}_{0.3}\text{Mg}_{0.3}]\text{PO}_4$ 는 충전 종료 시 가장 높은 전압인 4.5V 이상에 도달한다. 충전 종료 시, $\text{LiFe}_{0.6}\text{Mn}_{0.4}\text{PO}_4$ 및

LiMnPO_4 화합물은 약 4.1V의 전압을 가질 수 있고, 이는 약 3.5V의 전압을 갖는 LiFePO_4 보다 높다. GED는 충전 또는 방전 곡선, 예컨대 도 6의 곡선(602, 604, 606, 및 608) 아래의 면적에 의해 계산될 수 있으며, 이는 전압에 용량을 곱한 것이다. 따라서, 곡선(602, 604, 606, 및 608) 아래 면적은 각 화합물의 GED를 나타낸다. 따라서, $\text{Li}[\text{Fe}_{0.4}\text{Mn}_{0.3}\text{Mg}_{0.3}]\text{PO}_4$ 는 4개 화합물 중에서 각각의 곡선(602) 아래 면적이 가장 크거나 또는 4개 화합물 중에서 가장 높은 GED를 갖는다.

[0147] x. 신경망 아키텍처 및 기계 학습

[0148] 도 7은 본 기술의 일부 측면에 따라 예시적 신경망 아키텍처를 도시한다. 아키텍처(700)는 렌더링 엔진 모델(신경 제어기)(330)에서 예시적 신경망 설명(701)에 의해 정의된 신경망(710)을 포함한다. 신경망(710)은 미디어 데이터를 렌더링하기 위한 렌더링 엔진의 신경망 구현을 나타낼 수 있다. 신경망 설명(701)은 신경망 아키텍처(700)를 포함하여 신경망(710)의 전체 사양을 포함할 수 있다. 예를 들어, 신경망 설명(701)은 신경망(710)의 아키텍처(700)(예로서, 층, 층 상호연결, 각 층의 노드 수 등)에 대한 설명 또는 사양; 입력 및 출력이 어떻게 형성되거나 처리되는지를 나타내는 입력 및 출력 설명; 신경망의 활성화 함수, 신경망의 연산 또는 필터 등의 표시; 가중치, 편향 등과 같은 신경망 매개변수; 기타 등등을 포함할 수 있다.

[0149] 신경망(710)은 신경망 설명(701)에서 정의된 아키텍처(700)를 반영한다. 이 예에서, 신경망(710)은 분말 정보 및 코인 셀 전기화학 데이터와 같은 입력 데이터를 포함하는 입력 층(702)을 포함한다. 하나의 설명적인 예에서, 입력 층(702)은 코인 셀 전기화학 데이터를 포함하는 시드 데이터를 포함할 수 있다.

[0150] 신경망(710)은 은닉 층(704A 내지 704N)(이하 통칭하여 "704")을 포함한다. 은닉 층(704)은 n 개의 은닉 층을 포함할 수 있고, 여기서 n 은 1 이상의 정수이다. 은닉 층의 수는 원하는 처리 결과 및/또는 렌더링 의도에 필요한 만큼의 층을 포함할 수 있다. 신경망(710)은 은닉 층(704)에 의해 수행한 처리에서 생성된 출력(예로서, 코인 셀 에너지 밀도 또는 중량측정 에너지 밀도(GED), 탭 밀도, 또는 체적 에너지 밀도(VED) 등을 갖는 코인 셀을 생성하는 설계 공간의 변수)을 제공하는 출력 층(706)을 추가로 포함한다. 하나의 설명적인 예에서, 출력 층(706)은 코인 셀 에너지 밀도, GED, 탭 밀도, 또는 VED를 증가시킬 수 있는 설계 공간의 변수에 대한 매개변수를 제공할 수 있다.

[0151] 이 예에서 신경망(710)은 상호연결된 노드의 다층 신경망이다. 각 노드는 정보의 일부를 나타낼 수 있다. 노드와 관련된 정보는 서로 다른 층 간에 공유되고 각 층은 정보가 처리됨에 따른 정보를 유지한다. 일부 경우에, 신경망(710)은 피드-포워드(feed-forward) 신경망을 포함할 수 있고, 이 경우 신경망의 출력이 그 자체로 피드백되는 피드백 연결이 없다. 다른 경우에, 신경망(710)은 입력을 관독하는 동안 노드 간에 정보를 전달할 수 있도록 하는 루프를 가질 수 있는, 순환 신경망을 포함할 수 있다.

[0152] 정보는 다양한 층 간의 노드-투-노드 상호연결을 통해 노드 간에 교환될 수 있다. 입력 층(702)의 노드는 첫 번째 은닉 층(704A)의 노드 집합을 활성화할 수 있다. 예를 들어, 도시된 바와 같이, 입력 층(702)의 각 입력 노드는 첫 번째 은닉 층(704A)의 각 노드에 연결된다. 은닉 층(704A)의 노드는 정보에 활성화 함수를 적용하여 각 입력 노드의 정보를 변환할 수 있다. 그런 다음 변환에서 파생된 정보를 다음 은닉 층(예: 704B)의 노드로 전달하여 활성화할 수 있으며, 이 노드는 고유의 지정된 함수를 수행할 수 있다. 함수의 예는 합성곱, 업샘플링, 데이터 변환, 풀링, 및/또는 임의의 다른 적합한 함수를 포함한다. 이후 은닉 층(예: 704B)의 출력은 그 다음 은닉 층(예: 704N)의 노드를 활성화할 수 있는 등이다. 마지막 은닉 층의 출력은 출력 층(706)의 하나 이상의 노드를 활성화할 수 있으며, 이 지점에서 출력이 제공된다. 일부 경우에, 신경망(710)의 노드(예로서, 노드 708A, 708B, 708C)가 여러 출력 라인을 갖는 것으로 표시되는데, 하나의 노드는 단일 출력을 가지고 모든 라인에 동일한 출력 값을 나타내는 하나의 노드에서 출력되는 것으로 표시된다.

[0153] 일부 경우에, 각 노드 또는 노드 간 상호연결은 신경망(710)을 훈련하여 파생된 매개변수 집합인 가중치를 가질 수 있다. 신경망(700)이 훈련되면, 훈련된 신경망, 또는 훈련된 기계 학습 알고리즘이라고 지칭할 수 있으며 이는 하나 이상의 활동을 분류하는 데 사용될 수 있다. 예를 들어, 노드 간 상호연결은 상호연결된 노드에 대해 학습된 정보 조각을 나타낼 수 있다. 상호연결은 조정 가능한(예로서, 훈련 데이터세트 기반) 숫자 가중치를 가질 수 있으며, 이를 통해 보다 많은 데이터가 처리됨에 따라 신경망(710)이 입력에 적응하고 학습할 수 있다.

[0154] 신경망(710)은 상이한 은닉 층(704)을 사용하여 입력 층(702)의 데이터에서 특징을 처리하도록 사전 학습되어서 출력 층(706)을 통해 출력을 제공할 수 있다. 신경망(710)이 훈련된 객체 경로 예측 알고리즘으로부터 객체 충돌 경로를 식별하는 데 사용되는 예에서, 신경망(710)은 코인 셀 전기화학 데이터와 같은 실험에서 얻은 시드 데이터, 또는 실험에서 분말이 합성된 경우, 분말 정보를 포함하는 훈련 데이터를 사용하여 훈련될 수 있다. 예

를 들어, 훈련 시드 데이터는 신경망(710)에 입력될 수 있으며, 신경망(710)이 이를 처리하여 가중치, 편향 등과 같은 신경망(710)의 하나 이상의 측면을 조정하는 데 사용될 수 있는 출력을 생성할 수 있다.

[0155] 일부 경우에, 신경망(710)은 역전파(backpropagation)라는 훈련 프로세스를 사용하여 노드의 가중치를 조정할 수 있다. 역전파는 포워드 패스, 손실 함수, 백워드 패스, 및 가중치 업데이트를 포함할 수 있다. 포워드 패스, 손실 함수, 백워드 패스, 및 매개변수 업데이트는 한 번의 훈련 이터레이션에 대해 수행된다. 이 프로세스는 층의 가중치가 정확하게 조정될 때까지 각 훈련 미디어 데이터 집합에 대해 특정 횟수의 이터레이션으로 반복될 수 있다. 신경망(710)에 대한 첫 번째 훈련 이터레이션의 경우, 초기화 시 가중치가 무작위로 선택되기 때문에 출력은 임의의 특정 클래스에 우선권을 부여하지 않은 값을 포함할 수 있다. 예를 들어, 출력이 객체에 다른 제품(들) 및/또는 다른 사용자가 포함될 확률이 있는 벡터인 경우, 각 다른 제품 및/또는 사용자에게 대한 확률 값은 같거나 적어도 매우 유사할 수 있다(예로서, 10개의 가능한 제품 또는 사용자에게 대해, 각 클래스는 0.1의 확률 값을 가질 수 있음). 초기 가중치를 사용하면, 신경망(710)은 저수준 특징을 결정할 수 없으므로 객체의 분류가 무엇인지 정확하게 결정할 수 없다. 손실 함수를 사용하여 출력의 오류를 분석할 수 있다. 임의의 적합한 손실 함수 정의를 사용할 수 있다. 교차 엔트로피 손실과 같은 임의의 적합한 손실 함수 정의를 사용할 수 있다. 손실 함수의 또 다른 예는 평균 제곱 오차(MSE)를 포함하며, $E_{total} = \sum (1/2 (\text{표적}-\text{출력})^2)$ 으로 정의된다. 손실은 E_{total} 의 값과 같도록 설정될 수 있다.

[0156] 실제 값이 예측 출력과 다를 것이기 때문에 첫 번째 훈련 데이터세트(예로서, 이미지)의 경우 손실(또는 오류)이 높을 수 있다. 훈련의 목표는 예측 출력이 표적 또는 이상적 출력과 컴포트하도록 손실의 양을 최소화하는 것이다. 신경망(710)은 신경망(710)의 손실에 가장 크게 기여한 입력(가중치)을 결정하여 백워드 패스를 수행할 수 있고, 손실이 감소하고 결국 최소화되도록 가중치를 조정할 수 있다.

[0157] 가중치에 대한 손실의 미분(dL/dW 로 표시, 여기서 W 는 특정 층의 가중치)을 계산하여 네트워크 손실에 가장 크게 기여한 가중치를 결정할 수 있다. 미분이 계산된 후, 필터의 모든 가중치를 업데이트하여 가중치 업데이트를 수행할 수 있다. 예를 들어, 가중치를 업데이트하여 그래디언트의 반대 방향으로 변경되도록 할 수 있다. 가중치 업데이트는 $w=w_i-\eta \text{ } dL/dW$ 로 표시할 수 있으며, 여기서 w 는 가중치를 나타내고, w_i 는 초기 가중치를 나타내고, η 는 학습률을 나타낸다. 학습률은 임의의 적절한 값으로 설정될 수 있으며, 높은 학습률에는 보다 큰 가중치 업데이트가 포함되고 보다 낮은 값은 보다 작은 가중치 업데이트를 나타낸다.

[0158] 신경망(710)은 임의의 적절한 신경망 또는 딥 러닝 네트워크를 포함할 수 있다. 하나의 예는 입력 층 및 출력 층을 포함하는 합성곱 신경망(CNN)을 포함하고, 입력 층 및 출력 층 사이에 여러 개의 은닉 층이 있다. CNN의 은닉 층은 일련의 합성곱, 비선형, 풀링(다운샘플링을 위해), 및 완전 연결 층을 포함한다. 다른 예에서, 신경망(710)은 오토 인코더, 심층 신뢰망(DBN), 순환 신경망(RNN) 등과 같은 임의의 다른 신경망 또는 딥 러닝 네트워크를 나타낼 수 있다.

[0159] 본 기술분야의 숙련된 기술자가 이해하는 바와 같이, 기계 학습 기반 분류 기술은 원하는 구현에 따라 달라질 수 있다. 예를 들어, 기계 학습 분류 체계는 다음 중 하나 이상을 단독으로 또는 조합하여 활용할 수 있다: 은닉 마르코프 모델; 순환 신경망; 합성곱 신경망(CNN); 딥 러닝; 베이저안 기호 방법; 생성형 적대적 신경망(GAN); 서포트 벡터 머신; 이미지 등록 방법; 적용가능한 규칙 기반 시스템. 회귀 알고리즘이 사용되는 경우, 다음을 비제한적으로 포함할 수 있다: 확률적 경사 하강법 회귀기법, 및/또는 패시브-어그레시브 회귀기법 등.

[0160] 기계 학습 분류 모델은 클러스터링 알고리즘(예로서, 미니 배치 K-평균 클러스터링 알고리즘), 추천 알고리즘(예로서, 미니와이즈 해싱 알고리즘, 또는 유클리드 지역 민감 해싱(LSH) 알고리즘), 및/또는 지역 이상치 요인과 같은 이상 탐지 알고리즘을 기반으로 할 수도 있다. 또한, 기계 학습 모델은 다음 중 하나 이상과 같은 차원 축소 접근법을 사용할 수 있다: 미니 배치 사전 학습 알고리즘, 증분 주성분 분석(PCA) 알고리즘, 잠재 디리클레 할당 알고리즘, 및/또는 미니 배치 K-평균 알고리즘 등.

[0161] 도 8은 본 기술의 일부 측면을 구현할 수 있는 예시적 프로세서 기반 시스템을 설명한다. 예를 들어, 프로세서 기반 시스템(800)은 시스템의 구성요소가 연결(805)을 사용하여 서로 통신하는 임의의 구성 컴퓨팅 장치, 또는 그의 임의의 구성요소일 수 있다. 연결(805)은 버스를 통한 물리적 연결, 또는 칩셋 아키텍처에서와 같이 프로세서(810)로의 직접 연결일 수 있다. 연결(805)은 또한 가상, 네트워크 연결, 또는 논리적 연결일 수 있다.

[0162] 일부 구현예에서, 컴퓨팅 시스템(800)은 본 발명에서 설명된 기능이 데이터 센터, 여러 데이터 센터, 피어 네트워크 등 내에 분산될 수 있는 분산 시스템이다. 일부 구현예에서, 설명된 시스템 구성요소 중 하나 이상은 구성요소가 설명된 기능의 일부 또는 전부를 각각 수행하는 이러한 많은 구성요소를 나타낸다. 일부 구현예에서, 구

성요소는 물리적 또는 가상 장치일 수 있다.

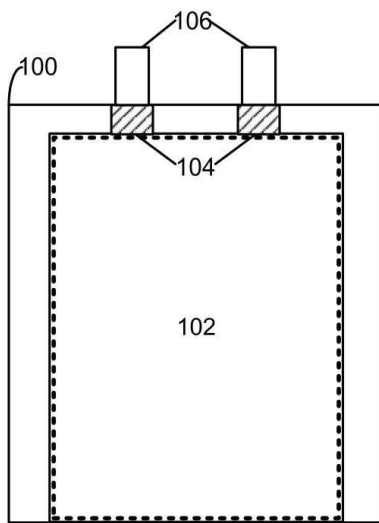
- [0163] 예시 시스템(800)은 적어도 하나의 처리 장치(중앙 처리 장치(CPU) 또는 프로세서)(810) 및 읽기 전용 메모리(Read-Only Memory, ROM)(820) 및 랜덤 액세스 메모리(Random-Access Memory, RAM)(825)와 같은 시스템 메모리(815)를 포함한 다양한 시스템 구성요소를 프로세서(810)에 커플링하는 연결(805)을 포함한다. 컴퓨팅 시스템(800)은 프로세서(810)에 직접 연결되거나, 가까이 연결되거나, 또는 프로세서(810)의 일부로 통합된 고속 메모리(812)의 캐시(cache)를 포함할 수 있다.
- [0164] 프로세서(810)는 프로세서(810) 뿐만 아니라 소프트웨어 명령어가 실제 프로세서 설계에 통합된 특수 목적 프로세서를 제어하도록 구성된, 임의의 범용 프로세서 및 하드웨어 서비스 또는 소프트웨어 서비스, 예컨대 저장 장치(830)에 저장된 서비스(832, 834, 및 836)를 포함할 수 있다. 프로세서(810)는 다중 코어 또는 프로세서, 버스, 메모리 제어기, 캐시 등을 포함하는 독립형 컴퓨팅 시스템일 수 있다. 다중 코어 프로세서는 대칭 또는 비대칭일 수 있다.
- [0165] 사용자 상호작용을 가능하게 하기 위해, 컴퓨팅 시스템(800)은 음성을 위한 마이크, 제스처 또는 그래픽 입력을 위한 접촉 감지 스크린, 키보드, 마우스, 모션 입력, 음성 등과 같은 임의의 수의 입력 메커니즘을 나타낼 수 있는 입력 장치(845)를 포함한다. 컴퓨팅 시스템(800)은 또한 본 기술분야의 숙련된 기술자에게 알려진 많은 출력 메커니즘 중 하나 이상일 수 있는 출력 장치(835)를 포함할 수 있다. 일부 경우에, 멀티모달 시스템을 통해 사용자가 여러 유형의 입력/출력을 제공하여 컴퓨팅 시스템(800)과 통신할 수 있다. 컴퓨팅 시스템(800)은 일반적으로 사용자 입력 및 시스템 출력을 제어하고 관리할 수 있는 통신 인터페이스(840)를 포함할 수 있다. 통신 인터페이스는 오디오 잭/플러그, 마이크 잭/플러그, 범용 직렬 버스(Universal Serial Bus, USB) 포트/플러그, Apple® Lightning® 포트/플러그, 이더넷 포트/플러그, 광섬유 포트/플러그, 전용 유선 포트/플러그, BLUETOOTH® 무선 신호 전송, BLUETOOTH® 저에너지(BLE) 무선 신호 전송, IBEACON® 무선 신호 전송, 무선 주파수 식별(Radio-Frequency Identification, RFID) 무선 신호 전송, 근거리 무선 통신(Near-Field Communications, NFC) 무선 신호 전송, 전용 단거리 통신(Dedicated Short Range Communication, DSRC) 무선 신호 전송, 802.11 Wi-Fi® 무선 신호 전송, 무선 로컬 영역 네트워크(Wireless Local Area Network, WLAN) 신호 전송, 가시광선 통신(Visible Light Communication, VLC) 신호 전송, 마이크로파 접속을 위한 전세계 상호운용(Worldwide Interoperability for Microwave Access, WiMAX), 적외선(IR) 통신 무선 신호 전송, 공중 교환 전화망(Public Switched Telephone Network, PSTN) 신호 전송, 통합 서비스 디지털 네트워크(ISDN) 신호 전송, 3G/4G/5G/LTE 셀룰러 데이터 네트워크 무선 신호 전송, 애드혹 네트워크 신호 전송, 라디오파 신호 전송, 마이크로파 신호 전송, 적외선 신호 전송, 가시광선 신호 전송, 자외선 신호 전송, 전자기 스펙트럼을 따른 무선 신호 전송, 또는 이들의 일부 조합을 사용하는 것을 포함하여, 유선 및/또는 무선 트랜시버를 통해 유선 또는 무선 통신의 수신 및/또는 전송을 수행하거나 용이하게 할 수 있다.
- [0166] 통신 인터페이스(840)는 또한 하나 이상의 글로벌 항법 위성 시스템(GNSS) 시스템과 관련된 하나 이상의 위성으로부터 하나 이상의 신호를 수신하는 것에 기반해 컴퓨팅 시스템(800)의 위치를 결정하는 데 사용되는 하나 이상의 GNSS 수신기 또는 송수신기를 포함할 수 있다. GNSS 시스템은 비제한적으로 미국 기반 글로벌 포지셔닝 시스템(GPS), 러시아 기반 글로벌 항법 위성 시스템(GLONASS), 중국 기반 베이더우 항법 위성 시스템(BDS), 및 유럽 기반 갈릴레오 GNSS를 포함한다. 임의의 특정 하드웨어 배열에서 작동하는 데 제한이 없으므로, 여기서 기본 기능은 개발됨에 따라 개선된 하드웨어 또는 펌웨어 배열로 쉽게 대체될 수 있다.
- [0167] 저장 장치(830)는 비휘발성 및/또는 비일시적 및/또는 컴퓨터 판독가능 메모리 장치일 수 있으며, 하드 디스크 또는 컴퓨터로 접근가능한 데이터를 저장할 수 있는 컴퓨터 판독가능 매체의 기타 유형, 예컨대 자기 카세트, 플래시 메모리 카드, 솔리드 스테이트 메모리 장치, 디지털 다기능 디스크, 카트리지, 플로피 디스크, 플렉시블 디스크, 하드 디스크, 자기 테이프, 자기 스트립/스트라이프, 기타 임의의 자기 저장 매체, 플래시 메모리, 메모리스트어 메모리, 기타 임의의 솔리드 스테이트 메모리, 콤팩트 디스크(CD) 읽기 전용 메모리(CD-ROM) 광 디스크, 재기록 가능 CD 광 디스크, 디지털 비디오 디스크(DVD) 광 디스크, 블루레이 디스크(BD) 광 디스크, 홀로그래픽 광 디스크, 기타 광 매체, 보안 디지털(SD) 카드, 마이크로 SD(microSD) 카드, 메모리 스틱® 카드, 스마트카드 칩, EMV 칩, 가입자 식별 모듈(SIM) 카드, 미니/마이크로/나노/피코 SIM 카드, 다른 집적 회로(IC) 칩/카드, 랜덤 액세스 메모리(RAM), 정적 RAM(SRAM), 동적 RAM(DRAM), 읽기 전용 메모리(ROM), 프로그래밍 가능 ROM(PROM), 소거 가능 PROM(EPROM), 전기적으로 소거 가능 PROM(EEPROM), 플래시 EPROM(FLASH EPROM), 캐시 메모리(L1/L2/L3/L4/L5/L#), 저항성 RAM(RRAM/ReRAM), 상변화 메모리(PCM), 스핀 전달 토크 RAM(STT-RAM), 다른 메모리 칩 또는 카트리지, 및/또는 이들의 조합일 수 있다.

- [0168] 저장 장치(830)는 소프트웨어 서비스, 서버, 서비스 등을 포함할 수 있으며, 이러한 소프트웨어를 정의하는 코드가 프로세서(810)에 의해 실행되면 시스템(800)이 기능을 수행하게 된다. 일부 구현예에서, 특정 기능을 수행하는 하드웨어 서비스는 프로세서(810), 연결(805), 출력 장치(835) 등과 같은 하드웨어 구성요소와 관련하여 컴퓨터 판독가능 매체에 저장된 소프트웨어 구성요소를 포함하여 기능을 수행할 수 있다.
- [0169] 본 발명의 범위 내의 구현예는 또한 컴퓨터 실행가능 명령어 또는 그 안에 저장된 데이터 구조를 전달하거나 운반하기 위한 유형적 및/또는 비일시적 컴퓨터 판독가능 저장 매체 또는 장치를 포함할 수 있다. 이러한 유형적 컴퓨터 판독가능 저장 장치는 전술한 바와 같은 임의의 특수 목적 프로세서의 기능적 설계를 포함하여, 범용 또는 특수 목적 컴퓨터에서 접근할 수 있는 모든 사용가능한 장치일 수 있다. 예시로서, 비제한적으로, 이러한 유형적 컴퓨터 판독가능 장치는 RAM, ROM, EEPROM, CD-ROM 또는 기타 광 디스크 스토리지, 자기 디스크 스토리지 또는 기타 자기 저장 장치, 또는 컴퓨터 실행가능 명령어, 데이터 구조, 또는 프로세서 칩 설계의 형태로 원하는 프로그램 코드를 전달하거나 저장하는 데 사용될 수 있는 임의의 기타 장치를 포함할 수 있다. 정보 또는 명령어가 네트워크 또는 다른 통신 연결(하드와이어, 무선, 또는 이들의 조합)을 통해 컴퓨터에 제공되면, 컴퓨터는 상기 연결을 컴퓨터 판독가능 매체로서 적절하게 간주한다. 따라서, 임의의 이러한 연결은 컴퓨터 판독가능 매체라고 적절하게 명명된다. 위의 조합도 컴퓨터 판독가능 저장 장치의 범위에 포함되어야 한다.
- [0170] 컴퓨터 실행가능 명령어는 예를 들어 범용 컴퓨터, 특수 목적 컴퓨터, 또는 특수 목적 처리 장치가 특정 기능 또는 기능 그룹을 수행하도록 하는 명령어 및 데이터를 포함한다. 컴퓨터 실행가능 명령어는 또한 독립형 또는 네트워크 환경에서 컴퓨터에 의해 실행되는 프로그램 모듈을 포함한다. 일반적으로, 프로그램 모듈은 작업을 수행하거나 추상 데이터 유형을 구현하는 루틴, 프로그램, 구성요소, 데이터 구조, 객체, 및 특수 목적 프로세서 설계의 기능 등을 포함한다. 컴퓨터 실행가능 명령어, 관련 데이터 구조, 및 프로그램 모듈은 본 명세서에 개시된 방법의 단계를 실행하기 위한 프로그램 코드 수단의 예를 나타낸다. 이러한 실행가능 명령어 또는 관련 데이터 구조의 특정 시퀀스는 이러한 단계에 설명된 기능을 구현하기 위한 해당 행위의 예를 나타낸다.
- [0171] 본 발명의 다른 구현예는 개인용 컴퓨터, 핸드헬드 장치, 다중 프로세서 시스템, 마이크로프로세서 기반 또는 프로그래밍 가능 가전 제품, 네트워크 개인용 컴퓨터(PC), 미니 컴퓨터, 중앙 컴퓨터 등을 포함하여 다양한 유형의 컴퓨터 시스템 구성을 갖춘 네트워크 컴퓨팅 환경에서 실행될 수 있다. 구현예는 또한 통신 네트워크를 통해 연결된(하드와이어 링크, 무선 링크, 또는 이들의 조합) 로컬 및 원격 처리 장치에 의해 작업이 수행되는 분산 컴퓨팅 환경에서 실행될 수 있다. 분산 컴퓨팅에서 환경에서, 프로그램 모듈은 로컬 및 원격 메모리 저장 장치 모두에 위치할 수 있다.
- [0172] 본 명세서에 설명된 캐소드 물질 또는 캐소드 활성 물질은 본 기술분야에 알려진 임의의 배터리 셀 또는 그의 구성요소와 함께 사용될 수 있음을 이해할 것이다. 예를 들어, 권취형 배터리 셀 외에도, 층을 적층하고 및/또는 사용하여 바이셀 구조와 같은 기타 유형의 배터리 셀 구조를 형성할 수 있다. 이러한 모든 배터리 셀 구조는 본 기술분야에 알려져 있다.
- [0173] 전술한 다양한 구현예는 예시를 위해 제공된 것일 뿐이며, 발명의 범위를 제한하는 것으로 해석되어서는 안 된다. 예를 들어, 본 명세서에 설명된 원리는 최적화 및 일반적인 개선에 동일하게 적용된다. 본 명세서에 설명되고 서술된 예시적 구현예 및 응용품을 따르지 않고, 본 발명의 사상 및 범위를 벗어나지 않고, 본 명세서에 설명된 원리에 다양한 수정 및 변경을 가할 수 있다. "적어도 하나의" 세트를 인용하는 청구항 언어는 상기 세트의 하나의 구성원 또는 세트의 여러 구성원이 청구항을 충족함을 나타낸다.
- [0174] 조항 1. 식 (I) $\text{Li}(\text{Li}_x\text{TM}_y\text{TM}'_{(1-x-y)})(\text{P,A})\text{O}_4$ 로 표시되는 리튬 금속 폴리음이온(LMX) 화합물을 포함하는 분말, 여기서 $0.1 \leq x$, $0 \leq y < 1$, 및 $\text{Li}/(\text{TM}'+\text{TM}) > 1$ 이고, 여기서 TM은 Mn, Mg, Zn, Ca, Ni, Co, V, Al, Ti, Zr, Mo, Cr, 또는 기타 전이 금속으로부터 선택되는 하나 이상의 원소이고, 여기서 TM'은 Fe 및 Mn 전이 금속의 조합이다.
- [0175] 조항 2. 조항 1의 분말로서, 여기서 식 (I)로 표시되는 화합물을 생성하는 데 필요한 적어도 하나의 공정 변수 또는 적어도 하나의 화학양론 변수는 기계 학습 알고리즘에 의해 제공된다.
- [0176] 조항 3. 조항 1 또는 조항 2의 분말로서, TM은 Mo이고, 상기 화합물은 $\text{Li}[\text{Li}]_{0.2}\text{Fe}_{0.2}\text{Mn}_{0.5}\text{Ti}_{0.1}\text{PO}_4$ 로 표시된다.
- [0177] 조항 4. 조항 1 내지 조항 3 중 어느 하나의 분말로서, TM은 V이고, 상기 화합물은 $\text{Li}[\text{Li}]_{0.1}\text{Fe}_{0.8}\text{V}_{0.1}\text{PO}_4$ 로 표시된다.
- [0178] 조항 5. 조항 1 내지 조항 4 중 어느 하나의 분말로서, 상기 화합물은 $\text{Li}[\text{Li}]_{0.1}\text{Mn}_{0.6}\text{Mg}_{0.2}\text{V}_{0.1}\text{PO}_4$ 로 표시된다.

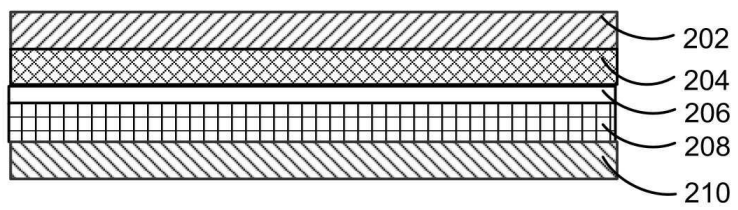
- [0179] 조항 6. 조항 1 내지 조항 5 중 어느 하나의 분말을 포함하는 캐소드 활성 물질.
- [0180] 조항 7. 조항 6의 캐소드 활성 물질을 포함하는 캐소드.
- [0181] 조항 8. 조항 7의 캐소드; 분리막; 및 애노드;를 포함하는 배터리 셀, 여기서 배터리 셀은 170 mAh/g를 초과하는 중량측정 용량을 포함한다.
- [0182] 조항 9. 식 (II) $\text{Li}[\text{Fe}_{1-x-y}\text{Mn}_x\text{TM}_y](\text{P},\text{A})\text{O}_4$ 로 표시되는 리튬 망간 포스페이트 화합물을 포함하는 분말, 여기서 $0.15 < x < 0.45$, $0.20 < y < 0.45$ 이고, 여기서 TM은 Mn, Mg, Zn, Ca, Ni, Co, V, Al, Ti, Zr, Mo, 및 Cr으로부터 선택되는 적어도 하나의 원소이다.
- [0183] 조항 10. 조항 9의 분말로서, 여기서 $x = 0.3$, $y = 0.3$, $\text{TM} = \text{Mg}$ 이고, 상기 화합물은 $\text{Li}[\text{Fe}_{0.4}\text{Mn}_{0.3}\text{Mg}_{0.3}]\text{PO}_4$ 로 표시된다.
- [0184] 조항 11. 조항 9 또는 조항 10의 분말로서, 여기서 $\text{Li}[\text{Fe}_{1-x-y}\text{Mn}_x\text{Mg}_y]\text{PO}_4$ 는 X선 회절(XRD) 분석을 기초로 LiFePO_4 와 동일한 구조를 갖는다.
- [0185] 조항 12. 조항 9 내지 조항 11 중 어느 하나의 분말로서, 여기서 A는 V, Si, 또는 W 중 하나를 나타낸다.
- [0186] 조항 13. 조항 9 내지 조항 12 중 어느 하나의 분말을 포함하는 캐소드 활성 물질.
- [0187] 조항 14. 조항 13의 캐소드 활성 물질을 포함하는 캐소드.
- [0188] 조항 15. 조항 14의 캐소드; 분리막; 및 애노드;를 포함하는 배터리 셀로서, 여기서 배터리 셀은 170 mAh/g를 초과하는 중량측정 용량을 포함한다.
- [0189] 조항 16. 조항 1 내지 조항 5 중 어느 하나의 LMX 화합물을 설계하는 방법으로서, 상기 방법은 실험적 접근법과 조합된 기계 학습(ML) 지원 설계를 사용하여 LMX 화합물의 조성을 최적화하여 170 mAh/g 초과 중량측정 용량을 달성하는 단계를 포함한다.
- [0190] 조항 17. 조항 16의 방법으로서, 상기 방법은 다음을 추가로 포함한다: 화합물을 합성하여 조항 1 내지 조항 5 중 어느 하나의 분말을 형성하는 단계; 분말 및 조항 8의 배터리 셀을 전기화학적 성능에 대해 평가하는 단계; 전기화학적 성능 및 분말 정보를 사용하여 기계 학습 모델을 훈련하는 단계; 사양의 집합 내에 속하는 분말 수준 지표의 제약 조건에 따라, 배터리 셀의 에너지 밀도를 출력으로서 사용하여 가우시안 프로세스 모델을 적용하는 단계; 획득 함수를 사용하여 에너지 밀도를 최대화할 가능성이 있는, 다음 이터레이션에서 평가할 N개의 변형을 결정하는 단계; N개의 변형을 합성하는 단계; 분말 및 배터리 셀의 전기화학적 성능을 평가하는 단계; 및 연속적 이터레이션의 차이가 임계값 아래로 떨어질 때까지 실험을 반복하고 ML 모델을 훈련하는 단계.
- [0191] 조항 18. 조항 9 내지 조항 12 중 어느 하나의 LMX 화합물을 설계하는 방법으로서, 상기 방법은 실험 접근법과 조합된 기계 학습(ML) 지원 설계를 사용하여 LMX 화합물의 조성을 최적화하여 170 mAh/g 초과 중량측정 용량을 달성하는 단계를 포함한다.
- [0192] 조항 19. 조항 18의 방법으로서, 상기 방법은 다음을 추가로 포함한다: 화합물을 합성하여 조항 9 내지 조항 12 중 어느 하나의 분말을 형성하는 단계; 분말 및 조항 15의 배터리 셀을 전기화학적 성능에 대해 평가하는 단계; 전기화학적 성능 및 분말 정보를 사용하여 기계 학습 모델을 훈련하는 단계; 사양의 집합 내에 속하는 분말 수준 지표의 제약 조건에 따라, 배터리 셀의 에너지 밀도를 출력으로서 사용하여 가우시안 프로세스 모델을 적용하는 단계; 획득 함수를 사용하여 에너지 밀도를 최대화할 가능성이 있는, 다음 이터레이션에서 평가할 N개의 변형을 결정하는 단계; N개의 변형을 합성하는 단계; 분말 및 배터리 셀의 전기화학적 성능을 평가하는 단계; 및 연속적 이터레이션의 차이가 임계값 아래로 떨어질 때까지 실험을 반복하고 ML 모델을 훈련하는 단계.

도면

도면1



도면2



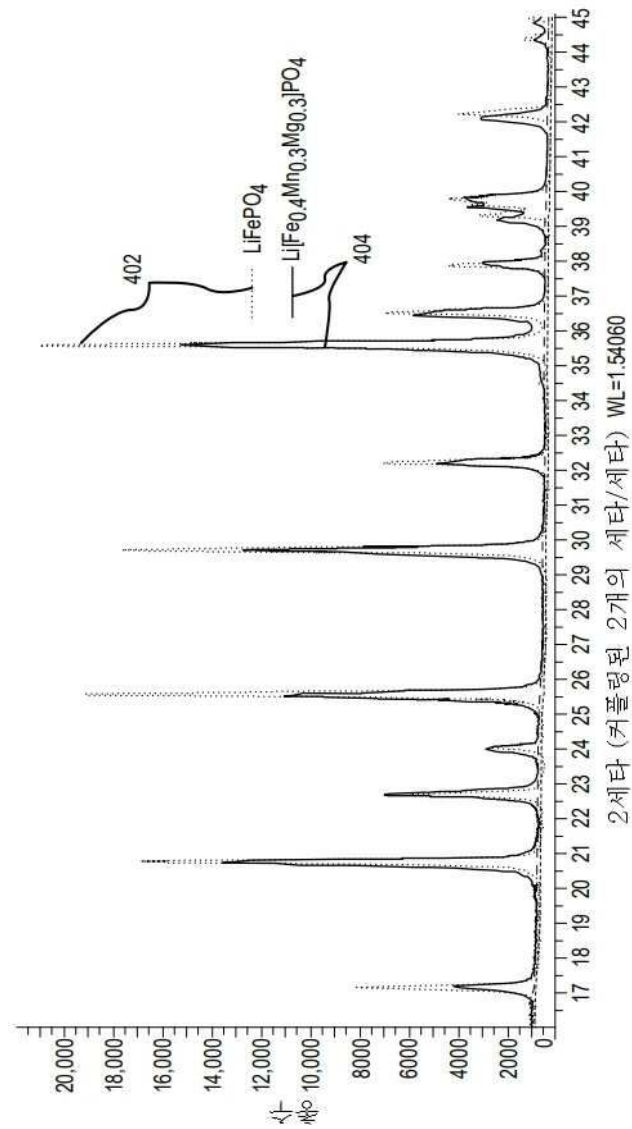
도면3

300

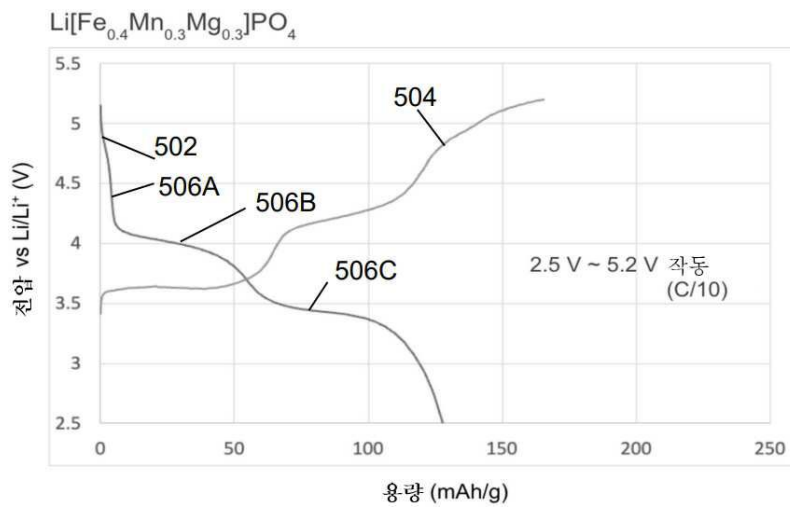
작업흐름도: 분말 및 셀 수준에서의 캐소드 합성 및 자격부여



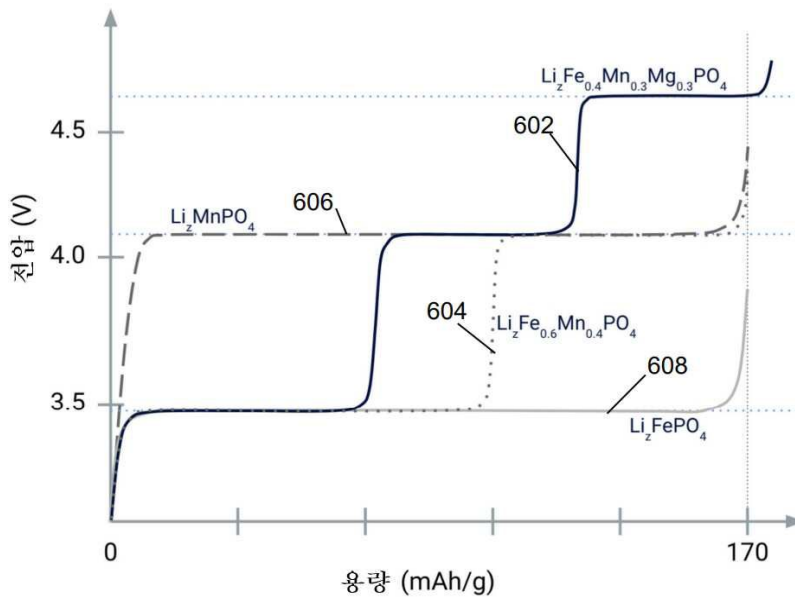
도면4



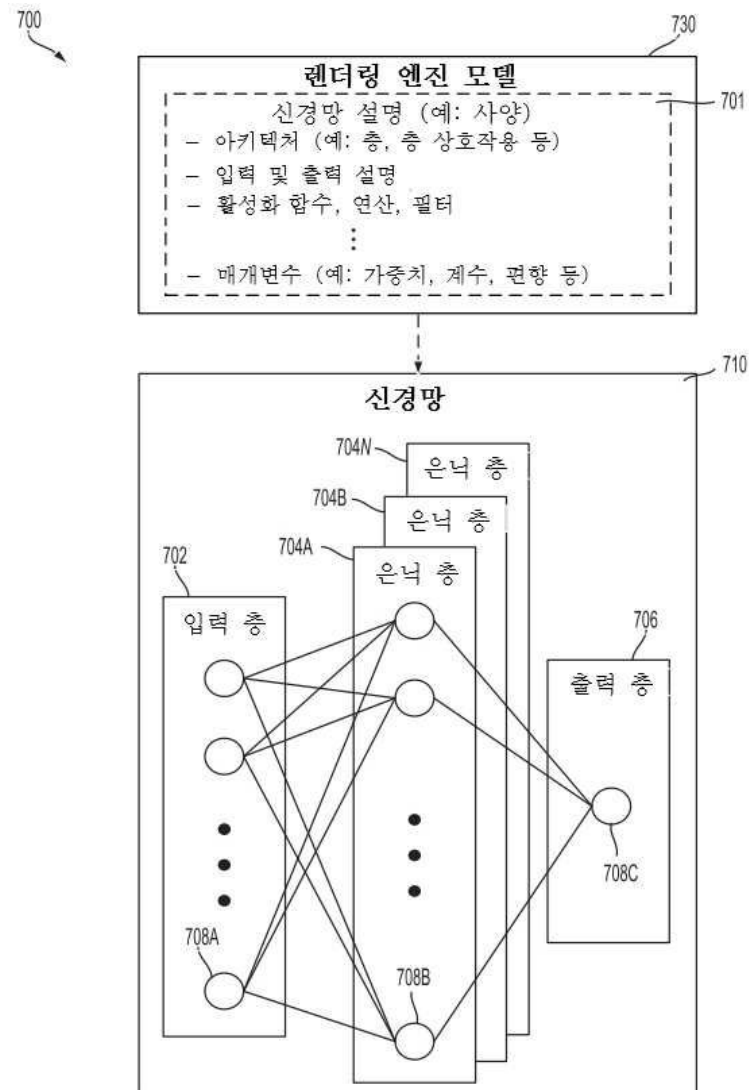
도면5



도면6



도면7



도면8

