

【公報種別】特許法第 17 条の 2 の規定による補正の掲載
【部門区分】第 7 部門第 1 区分
【発行日】令和 6 年 7 月 18 日(2024.7.18)

【公開番号】特開 2024-40467(P2024-40467A)
【公開日】令和 6 年 3 月 25 日(2024.3.25)
【年通号数】公開公報(特許)2024-054
【出願番号】特願 2024-21208(P2024-21208)
【国際特許分類】

H 0 1 M 4/525(2010.01)

10

H 0 1 M 4/587(2010.01)

H 0 1 M 10/052(2010.01)

【F I】

H 0 1 M 4/525

H 0 1 M 4/587

H 0 1 M 10/052

【手続補正書】

【提出日】令和 6 年 7 月 5 日(2024.7.5)

【手続補正 1】

20

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

正極と、負極と、電解液と、を有するリチウムイオン二次電池であって、
前記正極は、マグネシウムと、フッ素と、コバルト酸リチウムと、を有する正極活物質
を有し、

30

前記負極は、炭素系材料を含む負極活物質を有し、

前記正極活物質は、放電状態において O 3 型結晶構造を有し、

前記正極活物質は、充電状態において擬スピネル型結晶構造、及び H 1 - 3 型結晶構造
を有し、

前記充電状態における前記正極を、Cu K 1 線による粉末 X 線回折で分析したとき
の前記正極の X R D パターンにおいて、前記擬スピネル型結晶構造を示す回折ピークのう
ち一番高い回折ピークは、前記 H 1 - 3 型結晶構造を示す回折ピークのうち一番高い回折
ピークよりも高く観察される、リチウムイオン二次電池。

【請求項 2】

正極と、負極と、電解液と、を有するリチウムイオン二次電池であって、

前記正極は、マグネシウムと、フッ素と、アルミニウムと、コバルト酸リチウムと、を有
する正極活物質を有し、

40

前記負極は、炭素系材料を含む負極活物質を有し、

前記正極活物質の表層部は、マグネシウムと、フッ素と、を有し、

前記フッ素は前記電解液と接する領域に存在し、

前記正極活物質は、放電状態において O 3 型結晶構造を有し、

前記正極活物質に対する E D X 線分析において、アルミニウム濃度のピークは、マグネシ
ウム濃度のピークよりも深い領域にあり、

前記正極活物質は、充電状態において擬スピネル型結晶構造、及び H 1 - 3 型結晶構造を
有し、

前記充電状態における前記正極を、Cu K 1 線による粉末 X 線回折で分析したときの前

50

記正極の X R D パターンにおいて、前記擬スピネル型結晶構造を示す回折ピークのうち一番高い回折ピークは、前記 H 1 - 3 型結晶構造を示す回折ピークのうち一番高い回折ピークよりも高く観察される、リチウムイオン二次電池。

【請求項 3】

正極と、負極と、電解液と、を有するリチウムイオン二次電池であって、
前記正極は、マグネシウムと、フッ素と、アルミニウムと、コバルト酸リチウムと、を有する正極活物質を有し、

前記負極は、炭素系材料を含む負極活物質を有し、

前記正極活物質の表層部は、マグネシウムと、フッ素と、を有し、

前記正極活物質は、放電状態において O 3 型結晶構造を有し、

前記正極活物質に対する E D X 線分析において、アルミニウム濃度のピークは、マグネシウム濃度のピークよりも深い領域にあり、且つフッ素濃度のピークは前記正極活物質の表面から 0 . 5 n m までに存在し、

前記正極活物質は、充電状態において擬スピネル型結晶構造、及び H 1 - 3 型結晶構造を有し、

前記充電状態における前記正極を、C u K 1 線による粉末 X 線回折で分析したときの前記正極の X R D パターンにおいて、前記擬スピネル型結晶構造を示す回折ピークのうち一番高い回折ピークは、前記 H 1 - 3 型結晶構造を示す回折ピークのうち一番高い回折ピークよりも高く観察される、リチウムイオン二次電池。

10

【請求項 4】

正極と、負極と、電解液と、を有するリチウムイオン二次電池であって、

前記正極は、マグネシウムと、フッ素と、アルミニウムと、コバルト酸リチウムと、を有する正極活物質を有し、

前記負極は、炭素系材料を含む負極活物質を有し、

前記正極活物質の表層部は、マグネシウムと、フッ素と、を有し、

前記正極活物質は、放電状態において O 3 型結晶構造を有し、

前記正極活物質に対する E D X 線分析において、アルミニウム濃度のピークは、マグネシウム濃度のピークよりも深い領域にあり、且つフッ素濃度のピークは前記正極活物質の表面から 1 n m までに存在し、

前記正極活物質は、充電状態において擬スピネル型結晶構造、及び H 1 - 3 型結晶構造を有し、

前記充電状態における前記正極を、C u K 1 線による粉末 X 線回折で分析したときの前記正極の X R D パターンにおいて、前記擬スピネル型結晶構造を示す回折ピークのうち一番高い回折ピークは、前記 H 1 - 3 型結晶構造を示す回折ピークのうち一番高い回折ピークよりも高く観察される、リチウムイオン二次電池。

20

30

【請求項 5】

正極と、負極と、電解液と、を有するリチウムイオン二次電池であって、

前記正極は、マグネシウムと、フッ素と、アルミニウムと、コバルト酸リチウムと、を有する正極活物質を有し、

前記負極は、炭素系材料を含む負極活物質を有し、

前記正極活物質の表層部は、マグネシウムと、フッ素と、を有し、

前記正極活物質は、放電状態において O 3 型結晶構造を有し、

前記正極活物質に対する E D X 線分析において、アルミニウム濃度のピークは、マグネシウム濃度のピークよりも深い領域にあり、

前記正極活物質の表層部の一部は岩塩型の結晶構造を有し、前記正極活物質はさらに前記岩塩型の結晶構造と結晶の配向が概略一致する層状岩塩型の結晶構造を有し、

前記正極活物質は、充電状態において擬スピネル型結晶構造、及び H 1 - 3 型結晶構造を有し、

前記充電状態における前記正極を、C u K 1 線による粉末 X 線回折で分析したときの前記正極の X R D パターンにおいて、前記擬スピネル型結晶構造を示す回折ピークのうち

40

50

番高い回折ピークは、前記 H 1 - 3 型結晶構造を示す回折ピークのうち一番高い回折ピークよりも高く観察される、リチウムイオン二次電池。

【請求項 6】

請求項 1 乃至 5 のいずれか一において、

前記正極の X R D パターンにおいて、前記擬スピネル型結晶構造を示す回折ピークのうち一番高い回折ピークは、 $2\theta = 19.30 \pm 0.20^\circ$ に観察される回折ピークである、リチウムイオン二次電池。

【請求項 7】

請求項 6 において、

前記正極の X R D パターンにおいて、さらに、前記擬スピネル型結晶構造を示す回折ピークとして、 $2\theta = 45.55 \pm 0.10^\circ$ に観察される回折ピークを有する、リチウムイオン二次電池。 10

【請求項 8】

正極と、負極と、電解液と、を有するリチウムイオン二次電池であって、

前記正極は、マグネシウムと、フッ素と、コバルト酸リチウムと、を有する正極活物質を有し、

前記負極は、炭素系材料を含む負極活物質を有し、

前記正極活物質は、放電状態において O 3 型結晶構造を有し、

前記正極活物質は、充電状態において擬スピネル型結晶構造、及び H 1 - 3 型結晶構造を有し、 20

前記充電状態における前記正極を、Cu K α 1 線による粉末 X 線回折で分析したときの前記正極の X R D パターンにおいて、前記擬スピネル型結晶構造を示す回折ピークのうち $2\theta = 19.30 \pm 0.20^\circ$ に観察される回折ピークは、 $2\theta = 19.50^\circ$ から 20.00° までに観察される前記 H 1 - 3 型結晶構造を示す回折ピークよりも高く観察される、リチウムイオン二次電池。

【請求項 9】

正極と、負極と、電解液と、を有するリチウムイオン二次電池であって、

前記正極は、マグネシウムと、フッ素と、アルミニウムと、コバルト酸リチウムと、を有する正極活物質を有し、

前記負極は、炭素系材料を含む負極活物質を有し、 30

前記正極活物質の表層部は、マグネシウムと、フッ素と、を有し、

前記フッ素は前記電解液と接する領域に存在し、

前記正極活物質は、放電状態において O 3 型結晶構造を有し、

前記正極活物質に対する E D X 線分析において、アルミニウム濃度のピークは、マグネシウム濃度のピークよりも深い領域にあり、

前記正極活物質は、充電状態において擬スピネル型結晶構造、及び H 1 - 3 型結晶構造を有し、

前記充電状態における前記正極を、Cu K α 1 線による粉末 X 線回折で分析したときの前記正極の X R D パターンにおいて、前記擬スピネル型結晶構造を示す回折ピークのうち $2\theta = 19.30 \pm 0.20^\circ$ に観察される回折ピークは、 $2\theta = 19.50^\circ$ から 20.00° までに観察される前記 H 1 - 3 型結晶構造を示す回折ピークよりも高く観察される、リチウムイオン二次電池。 40

【請求項 10】

正極と、負極と、電解液と、を有するリチウムイオン二次電池であって、

前記正極は、マグネシウムと、フッ素と、アルミニウムと、コバルト酸リチウムと、を有する正極活物質を有し、

前記負極は、炭素系材料を含む負極活物質を有し、

前記正極活物質の表層部は、マグネシウムと、フッ素と、を有し、

前記正極活物質は、放電状態において O 3 型結晶構造を有し、

前記正極活物質に対する E D X 線分析において、アルミニウム濃度のピークは、マグネシ 50

ウム濃度のピークよりも深い領域にあり、且つフッ素濃度のピークは前記正極活物質の表面から 0.5 nm までに存在し、
前記正極活物質は、充電状態において擬スピネル型結晶構造、及び H 1 - 3 型結晶構造を有し、
前記充電状態における前記正極を、Cu K 1 線による粉末 X 線回折で分析したときの前記正極の XRD パターンにおいて、前記擬スピネル型結晶構造を示す回折ピークのうち $2\theta = 19.30 \pm 0.20^\circ$ に観察される回折ピークは、 $2\theta = 19.50^\circ$ から 20.00° までに観察される前記 H 1 - 3 型結晶構造を示す回折ピークよりも高く観察される、リチウムイオン二次電池。

【請求項 11】

10

正極と、負極と、電解液と、を有するリチウムイオン二次電池であって、
前記正極は、マグネシウムと、フッ素と、アルミニウムと、コバルト酸リチウムと、を有する正極活物質を有し、
前記負極は、炭素系材料を含む負極活物質を有し、
前記正極活物質の表層部は、マグネシウムと、フッ素と、を有し、
前記正極活物質は、放電状態において O 3 型結晶構造を有し、
前記正極活物質に対する EDX 線分析において、アルミニウム濃度のピークは、マグネシウム濃度のピークよりも深い領域にあり、且つフッ素濃度のピークは前記正極活物質の表面から 1 nm までに存在し、
前記正極活物質は、充電状態において擬スピネル型結晶構造、及び H 1 - 3 型結晶構造を有し、
前記充電状態における前記正極を、Cu K 1 線による粉末 X 線回折で分析したときの前記正極の XRD パターンにおいて、前記擬スピネル型結晶構造を示す回折ピークのうち $2\theta = 19.30 \pm 0.20^\circ$ に観察される回折ピークは、 $2\theta = 19.50^\circ$ から 20.00° までに観察される前記 H 1 - 3 型結晶構造を示す回折ピークよりも高く観察される、リチウムイオン二次電池。

20

【請求項 12】

正極と、負極と、電解液と、を有するリチウムイオン二次電池であって、
前記正極は、マグネシウムと、フッ素と、アルミニウムと、コバルト酸リチウムと、を有する正極活物質を有し、
前記負極は、炭素系材料を含む負極活物質を有し、
前記正極活物質の表層部は、マグネシウムと、フッ素と、を有し、
前記正極活物質は、放電状態において O 3 型結晶構造を有し、
前記正極活物質に対する EDX 線分析において、アルミニウム濃度のピークは、マグネシウム濃度のピークよりも深い領域にあり、
前記正極活物質の表層部の一部は岩塩型の結晶構造を有し、前記正極活物質はさらに前記岩塩型の結晶構造と結晶の配向が概略一致する層状岩塩型の結晶構造を有し、
前記正極活物質は、充電状態において擬スピネル型結晶構造、及び H 1 - 3 型結晶構造を有し、
前記充電状態における前記正極を、Cu K 1 線による粉末 X 線回折で分析したときの前記正極の XRD パターンにおいて、前記擬スピネル型結晶構造を示す回折ピークのうち $2\theta = 19.30 \pm 0.20^\circ$ に観察される回折ピークは、 $2\theta = 19.50^\circ$ から 20.00° までに観察される前記 H 1 - 3 型結晶構造を示す回折ピークよりも高く観察される、リチウムイオン二次電池。

30

40

【請求項 13】

請求項 8 乃至 12 のいずれか一において、
前記正極の XRD パターンにおいて、さらに、前記擬スピネル型結晶構造を示す回折ピークとして、 $2\theta = 45.55 \pm 0.10^\circ$ に観察される回折ピークを有する、リチウムイオン二次電池。

【請求項 14】

50

請求項 1 乃至 1 3 のいずれかーにおいて、

前記正極の X R D パターンにおいて、リートベルト解析を行ったとき、前記擬スピネル型結晶構造が 5 0 w t % 以上である、リチウムイオン二次電池。

【請求項 1 5】

請求項 1 乃至 1 3 のいずれかーにおいて、

前記正極の X R D パターンにおいて、リートベルト解析を行ったとき、前記擬スピネル型結晶構造が 6 0 w t % 以上である、リチウムイオン二次電池。

【請求項 1 6】

請求項 1 乃至 1 3 のいずれかーにおいて、

前記正極の X R D パターンにおいて、リートベルト解析を行ったとき、前記擬スピネル型結晶構造が 6 6 w t % 以上である、リチウムイオン二次電池。 10

【請求項 1 7】

請求項 1 乃至 1 6 のいずれかーにおいて、

前記充電状態は、前記正極と対極にリチウム金属を用いた電池において、前記電池を 4 . 6 V まで充電した後である、リチウムイオン二次電池。

【請求項 1 8】

請求項 1 7 において、

前記放電状態は、前記充電の前である、リチウムイオン二次電池。

【請求項 1 9】

請求項 1 乃至 1 8 のいずれかーにおいて、 20

前記擬スピネル型結晶構造は、結晶構造が空間群 R - 3 m であり、ユニットセルにおいて C o の座標が (0 、 0 、 0 . 5) 、酸素の座標が (0 、 0 、 x) (ただし 0 . 2 0 x 0 . 2 5) で示される、リチウムイオン二次電池。

【請求項 2 0】

請求項 2 乃至 5 、 9 乃至 1 2 のいずれかーにおいて、

前記正極活物質の表層部は、コバルトを有する、リチウムイオン二次電池。

30

40

50