

BFA11

리튬 2차전지용 O2 및 O3구조의 LiMnO₂ 양극재료 특성 전산모사 First-principle calculations of properties of O2 & O3 LiMnO₂ cathode materials for secondary lithium battery

의일한, 박영식*, 정용재*, 김창경
한양대학교 재료공학부, *한양대학교 세라믹공학과

리튬 2차전지용 Li-Mn-O계 양극재료는 Li-Co-O계에 비해 풍부하고, 저렴한 가격의 장점을 지닌 반면, Jahn-Teller distortion을 일으키는 등 충·방전 시 구조적으로 불안정한 이유로 상업화에 한계성을 지니고 있다. 한편, 최근의 연구에서는 O2($P6_3mc$)구조를 가지는 Li-Mn-O계 양극물질의 합성으로 충·방전 시 나타나는 이러한 구조적인 불안정문제를 해결할 수 있는 가능성을 보여 주었다.¹⁾

본 연구에서는 지금까지 보고된 실험결과를 바탕으로 O2($P6_3mc$) 및 O3($R\bar{3}m$) 결정구조를 가지는 LiMnO₂ 양극물질 이용 시 예상되는 2차전지의 특성

을 전산모사를 통해 비교하였다. ab initio pseudopotential방법을 이용하여 리튬 이온이 각각 층상구조의 망간 산화물 내로 삽입(intercalation) 및 탈리(deintercalation)되었을 때의 평균삽입전압(average intercalation voltage)과 격자상수, 밴드구조, 상태밀도 등을 계산하였다.

계산된 결과로부터 O3구조의 양극물질에서는 평균삽입전압 및 격자상수의 경우 실험결과와 일치함을 확인 할 수 있었으며, O2구조와의 비교를 통해 구조에 따른 LiMnO₂ 양극물질의 특성을 조사하였다.

1) J. M. Paulsen, C. L. Thomas, and J. R. Dahn, *J. Electrochem. Soc.*, 146(10) 3560-3565 (1999)