이미지 기반의 NCM 양극재 일차 입자의 종횡비 분석

오준석¹, 곽다경², 정현승³, 권용현⁴, 류병석⁵, 김영균⁶ ¹강원대학교 문화예술·공과대학 배터리융합공학과 ²강원대학교 경제·정보통계학부 정보통계학과 ³강원대학교 문화예술·공과대학 기계의용·메카트로닉스공학과 ⁴한양대학교 공과대학 데이터사이언스전공 ⁵연세대학교 공과대학 화공생명공학과 ⁶융합소프트웨어랩

hnj08168@gmail.com, chloek69@naver.com, zzipbab0626@naver.com, mrkyh380@hanyang.ac.kr, bsryu@yonsei.ac.kr, ygkim-2004@hanmail.net

Analysis of Primary Particle Aspect Ratio in NCM Cathode Materials based on Images

Junseok Oh¹, DaGyeong Kwak², HyeonSeung Jeong³, Yonghyun Kwon⁴ Byeongseok Ryu⁵, YoungGyun Kim⁶

¹Dept. of Battery Convergence Engineering, Kangwon National University
²Dept. of Information Statistics, Kangwon National University
³Dept. of Mechatronics Engineering, Kangwon National University
⁴Dept. of Data Science, Hanyang University
⁵Dept. of Chemical & Biomolecular Engineering, Yonsei University
⁶Convergence Software Lab.

약

<u>B</u>

NCM 양극재는 높은 에너지 밀도로 인해 전기차 배터리에 널리 사용되며, 더 큰 용량과 긴 수명을 제공한다. 그러나 충방전 과정에서 발생하는 성능 저하는 양극재의 열화와 관련이 있다. 이를 억제하 기 위해 고종횡비의 긴 막대 형태의 일차 입자를 설계하여 미세 균열과 화학적 열화를 방지하는 것 이 중요하다. 본 연구는 OpenCV를 활용해 양극재 단면의 전자현미경 이미지를 분석하고 양극재 일 차 입자의 배향성과 종횡비를 정량적으로 분석하여, 배터리 소재 연구에서 더 객관적이고 신뢰성 있 는 데이터를 제공하고자 한다.

1. 서론

NCM(니켈, 코발트, 망간) 양극재는 리튬 망간 산화물(L MO) 기반으로, 니켈(Ni), 코발트(Co), 망간(Mn)이 결합된 형태이다. 이는 니켈, 코발트, 망간의 다양한 비율 조합으 로 구성되며, 배터리의 성능 및 특성을 최적화하는 데 기 여한다[1]. NCM 양극재를 사용하는 배터리는 LFP(리튬 인산철) 배터리와 비교하였을 때 에너지 밀도가 우수함으 로써, 더 큰 용량의 배터리를 제작하는 데 유리하며, 충· 방전 싸이클 이후에도 기존 성능을 유지하는 데 뛰어난 수명 특성을 가지고 있다. 이러한 이유로 NCM 배터리는 전기차 배터리에 널리 사용되며, 전기차의 주행 거리 증가 와 성능 향상에 기여하고 있다[2], 하지만 배터리의 충·방 전이 진행됨에 따라 성능 저하가 발생하는데 이것은 양극 재의 열화와 밀접한 관련이 있다. 양극재 열화의 주요 원 인은 전해액 침투로 인한 부반응이며, 이러한 침투는 양극 재 표면에 형성된 미세 균열(Microcrack)을 통해 일어난 다. 이러한 미세 균열은 니켈 함량이 0.8 이상일 때 급격

한 상전이로 인한 비대칭적 격자 수축으로 인해 발생한다 [3-4]. 미세 균열의 발생을 억제하기 위해서는 입자 중심 부를 향한 방사형 배향을 가진 얇고 긴 막대 형태(Rod-sh aped)의 일차 입자(Primary particle)를 갖추는 것이 필요 하다[5-6]. 긴 막대 형태의 일차 입자는 높은 종횡비를 가 지며, 일차 입자의 종횡비가 높을수록 내부 응력을 효과적 으로 분산시키고, 미세 균열의 축적과 화학적 열화를 효과 적으로 억제하여, 이는 리튬 이온의 확산과 전기화학적 성 능 개선에 유리하다. 이와 같은 구조적 특성 덕분에 충·방 전 싸이클 후에도 구조적 안정성을 유지할 수 있어 우수 한 용량 유지율을 보인다[7-9]. 따라서 본 연구는 오픈소 스 컴퓨터비전 라이브러리인 OpenCV[10]를 활용하여 양 극재 단면의 전자현미경 이미지를 분석하고, 양극재 일차 입자의 배향성과 종횡비를 정량분석함으로써 배터리의 성 능을 예측하는 데 기여하고자 한다. 이를 통해 배터리 소 재 연구에 있어 더 정확하고 신뢰성 있는 결과를 도출할 수 있을 것으로 기대된다.

2. 알고리즘 구현 및 실험

본 연구에서 사용된 개발 환경은 Python 버전 3.11.4와 OpenCV 버전 4.9.0이다. 양극재 이미지 분석을 위한 전체 흐름도는 **그림 1**과 같다.



(그림 1) 전체 흐름도

양극재 단면의 전자현미경 이미지의 경계를 수기로 보정 한 후, 전처리 과정인 블러링과 노이즈 제거를 거쳐 양극 재 전체 컨투어 검출을 통해 관찰하고자 하는 객체를 추 출하고 객체를 제외한 배경을 제거한다. 이후 추출한 객체 이미지를 이진화하고 일차 입자들의 컨투어를 검출한다. 최종적으로 SVD(Singular Value Decomposition, 특이값 분해)를 통해 주축(Major axis)과 부축(Minor axis)을 검 출하고 바운딩 박스를 통해 일차 입자들의 주축과 부축을 통해 계산된 종횡비 값을 기반으로 그래프를 생성하여 결 과를 시각화하였다.

2.1.1 1차 전처리

그림 2의 (a)는 100회 충·방전을 거친 NCM523 양극재 의 단면을 전자현미경으로 분석한 이미지이다. (b)는 해당 이미지를 수기 보정한 결과를, (c)는 컨투어 검출을 통해 양극재의 윤곽을 추출한 결과를 나타내며, (d)는 양극재를 제외한 주변 노이즈를 제거한 이미지를 보여준다. 양극재 이미지를 OpenCV로 전처리하기에 앞서, 원본 이미지의 입자 간 경계를 그림 2 (b)와 같이 수기로 보정할 필요가 있다. 그림 3 (a)의 빨간 원에서는 경계가 희미하게 나타 나지만, 확대된 그림 3 (c)는 경계 픽셀들의 명암비가 유 사하여 경계를 인식하기 어렵다. 이는 양극재 단면을 촬영 한 전자현미경 이미지에서 일반적으로 나타나는 특성으로 대다수의 경우 이와 같은 수기 보정이 요구된다. 이후, 수 기로 보정된 이미지를 가우시안 블러[11-12]를 적용해 미 세한 노이즈를 제거한다. 그 다음, 이진화를 적용 후 열기 와 닫기 연산을 통해 노이즈 제거 및 경계를 다듬는다. 마 지막으로, 컨투어를 검출한 후, 설정한 면적보다 작은 면 적을 갖는 요소들을 제거하였다.

2.1.2 2차 전처리

그림 4는 이진화 과정을 통해 각 객체의 컨투어를 검출

하고, SVD를 사용하여 주축과 부축을 계산한 결과를 나 타낸다. 이를 바탕으로 객체의 종횡비를 계산하였으며, 주 축과 부축을 기준으로 바운딩 박스를 설정하여 객체가 정 확히 검출되었는지 확인하였다. (a)는 불필요한 배경을 제 거한 이미지를, (b)는 이진화를 통해 컨투어를 검출한 이 미지를 보여준다. (c)에서는 SVD로 계산된 주축(빨간 축) 과 부축(파란 축)을 시각화하였고, (d)는 해당 축을 기준 으로 설정된 바운딩 박스를 통해 객체를 검출한 결과이다.



(그림 2) NCM 523 양극재의 단면 전자현미경 분석 이미지



(그림 3) 양극재 경계의 보정

2.2 배향성 분석

NCM523의 배향성을 평가하고 비교하기 위해, 상대적으 로 일차 입자의 모양이 긴 막대 형태인 NM73을 NCM523 과 동일한 이미지 전처리 과정을 거쳐 분석하였다. 배향성 은 입자 내에서 개별 결정 또는 구조가 특정 방향으로 정 렬된 정도를 의미한다. (c)에서는 주축과 부축이 다양한 방향으로 복잡하게 배향되어 있으며, 각 축이 교차하거나 서로 다른 각도로 분포하고 있어 배향성이 불균일하다고 평가된다. 반면, (d)에서는 규칙적이고 일관된 방향성이 관찰된다. 입자의 중심에서 바깥으로 방사형으로 뻗어나가 는 부축(파란축)이 뚜렷하게 나타나며, 이는 균일한 방사 형 배향성을 보여준다. 이러한 배향성은 입자의 성능에 직 접적인 영향을 미친다. 특히, 배향성이 우수한 일차 입자 는 효과적인 리튬 이온 이동 경로를 제공할 뿐만 아니라, 입자 내부에서 발생하는 응력을 효율적으로 분산시켜 균 열에 대한 저항성을 향상시킬 수 있다.



(그림 4) 양극재의 수평 및 수직축의 검출



(그립 5) NCM 523과 NM73의 컨투어 및 수평 및 수직 축의 검출

2.3 종횡비 측정

그림 6은 NCM523과 NM73의 1차 입자에 대한 종횡비 분포를 비교한 결과를 나타낸다. 종횡비는 입자의 길이와 너비의 비율로, 1에 가까울수록 입자의 형태가 더 원형에 가깝고, 값이 커질수록 긴 막대 형태를 의미한다. NCM52 3의 경우, 대부분의 입자가 종횡비 1에서 2 사이에 분포하 며, 특히 종횡비 1.2와 1.4 사이에서 뚜렷한 피크를 보인 다. 반면, NM73은 종횡비 2 이상인 구간에 입자가 주로 분포하며, 종횡비 2.3 부근에서 최대값을 나타낸다. 이후 종횡비가 증가함에 따라 NM73 입자의 수는 점진적으로 감소하는 경향을 보인다.



3. 실험 결과 분석

표 2는 실험으로 얻은 종횡비 값을 기반으로 NCM523과 NM73의 구간별 종횡비 분포를 비교한 결과를 보여준다. NCM523의 경우, 약 80%의 입자가 종횡비 1-2 구간에 분 포하고, 2-3 구간에는 약 18%의 입자가 분포한다. 반면, NM73은 1-2 구간에 약 17%의 입자가, 2-9 구간에 약 8 2%의 입자가 분포하며, 특히 2-3 구간에 상대적으로 많은 입자가 집중되어 있다. NCM523의 평균 종횡비는 1.64인 반면, NM73의 평균 종횡비는 3.50으로 NCM523보다 약 2.1배 높다. 그리고 표 2의 데이터를 통해 그림 7로 나타 내었고 이를 통해 NCM523과 NM73의 입자 분포 및 형태 적 차이를 시각화하였다.

<표 2>	NCM523,	NM73의	입자	개수	및	비율을	종횡비
		구간에	따라 는	큰류			

양극재	입자 종	종평비	0-1	1_9	9_9	2-4	4-5	E - C	6-7	7_0	0_0	종횡비
종류	개수	구간	0-1	1-2	2-3	3^{-4}	4-5	5-0	0-7	1-0	0-9	평규

NCM523 2		개수	1	164	36	1	1	0	0	0	0	1.64
	203	비율 (%)	0.49	80.79	17.73	0.49	0.49	0	0	0	0	
NM73		개수	2	23	43	24	16	16	7	3	2	3.50
	133	비율 (%)	1.50	17.29	32.33	18.04	12.03	12.03	5.26	2.26	1.50	



4. 결론 및 향후 연구

본 연구는 OpenCV를 활용하여 양극재 단면의 전자현미 경 이미지를 전처리과정을 거친 후, SVD를 이용하여 검 출한 양극재 일차 입자의 종횡비를 정량적으로 측정하고, 종횡비를 통해 배향성을 판단한다. 이러한 정량적 분석 결 과는 배터리 소재 연구에 있어 보다 객관적이고 신뢰성 있는 데이터를 제공하는 데 기여할 것으로 기대된다. 향후 연구에서는 하이니켈 양극재의 합성 온도 및 도핑·코팅 과정에서 첨가제 몰농도에 따른 실험 조건을 다양화하여 케이스를 구분하고, 각 조건에서 얻어진 양극재 전자현미 경 이미지를 기반으로 입자의 종횡비 및 배향성을 정량분 석하고자 한다.

참고문헌

- [1] LG Energy Solution. "인포그래픽9: 양극재 NCM." I nside LG Energy Solution, Apr. 2023, https://inside.lg ensol.com/2023/04
- [2] Gang, M.-B., Kim, W.-Y., & Kim, N.-J. Numerical comparative study on the thermal runaway of NCM/ LFP batteries of the same geometry. Korean Society for Geothermal and Hydrothermal Energy, 18(4), 1–1 1 .(2022).
- [3] Park, N.-Y., Park, G.-T., Kim, S.-B., Jung, W., Park, B.-C., & Sun, Y.-K. Degradation Mechanism of N i-Rich Cathode Materials: Focusing on Particle Interior. ACS Energy Letters, 7(7), 2362–2369. (2022).
- [4] Li, J., Zhou, Z., Luo, Z., He, Z., Zheng, J., Li, Y., Ma o, J., & Dai, K. Microcrack generation and modificati on of Ni-rich cathodes for Li-ion batteries: A revie w. Sustainable Materials and Technologies, 29, e0030 5. (2021).
- [5] Park, N.-Y., Ryu, H.-H., Park, G.-T., Noh, T.-C., & Sun, Y.-K. Optimized Ni-rich NCMA cathode for ele ctric vehicle batteries. Advanced Energy Materials, 1 1(2003767), 1–9. (2021).
- [6] Kim, Y., Park, K. J., Lee, H., Choi, S., & Sun, Y. K. Insights into the microstructural engineering of c obalt free, high nickel cathodes based on surface e nergy for lithium ion batteries. Advanced Energy M aterials, 13(21), 2204054. (2023).
- [7] Han, D., Zhang, H., Chen, Z., & Wang, Q. Enhancin g the long-term cycling stability of Ni-rich cathodes via regulating the length/width ratio of primary parti cle. Energy Materials, 4, 400001. (2024).
- [8] Ryu, H. H., Park, K. J., Sun, Y. K., & Aurbach, D. Capacity fading of Ni−rich Li[NixCoyMn1−x−y]O2 (0.6 ≤ x ≤ 0.95) cathodes for high-energy-density lithium-ion batteries. Chemistry of Materials, 30(4), 1 155-1163. (2018).

- [9] Kim, U. H., Kuo, L. Y., Sun, Y. K., & Aurbach, D. Heuristic solution for achieving long-term cycle sta bility for Ni-rich layered cathodes at full depth of discharge. Nature Energy, 5(11), 860–869. (2020).
- [10] OpenCV, https://opencv.org/releases/
- [11] G. Deng and L. W. Cahill, "An adaptive Gaussian f ilter for noise reduction and edge detection," 1993 I EEE Conference Record Nuclear Science Symposiu m and Medical Imaging Conference, San Francisco, CA, USA, pp. 1615–1619 vol.3, doi: 10.1109/NSSMI C.1993.373563. (1993).
- [12] Estevão S. Gedraite, Murielle Hadad, "Investigation on the Effect of a Gaussian Blur in Image Filtering and Segmentation", 53rd International Symposium E LMAR-2011, 14-16 September 2011, Zadar, Croatia