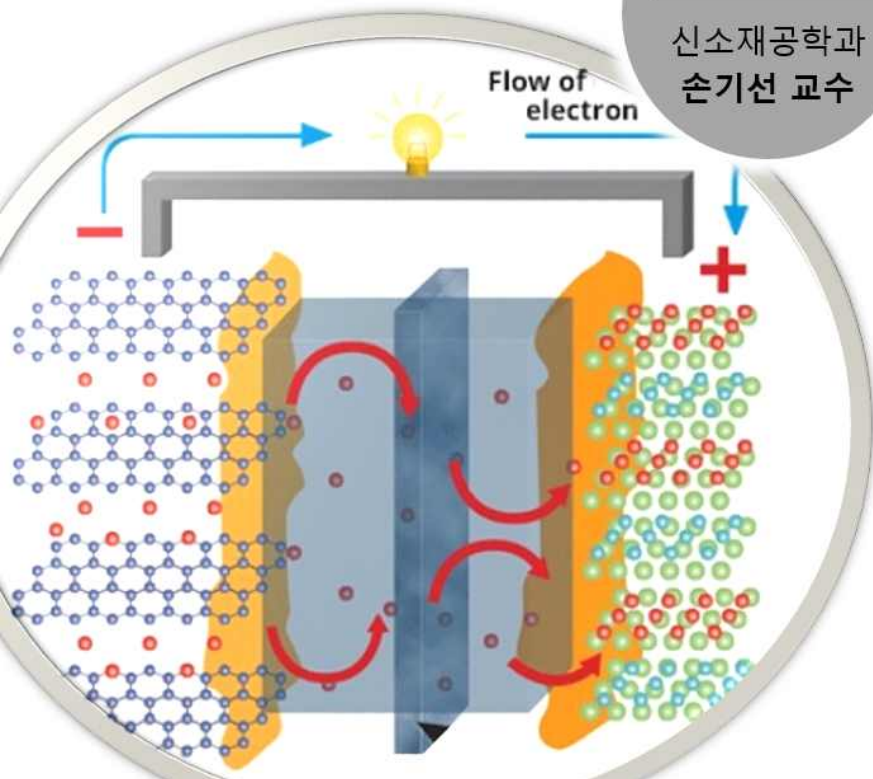


터널 결정구조의 칼륨 이차전지용 양극 활물질

본 기술은 칼륨 이차전지용 양극 활물질에 관한 것으로서, 총방전시 상전을 일으키는 것으로, $(K_{1-a}M_1)_a(V_{1-b}M_2)_bPcO_d$ 양극 활물질에 관한 것임

대표발명자

신소재공학과
손기선 교수



세종대학교
산학협력단

01 발명의 명칭

칼륨 이차 전지용 양극 활물질 및 칼륨 이차 전지

02 종래기술 대비 본 기술의 개요 및 특징

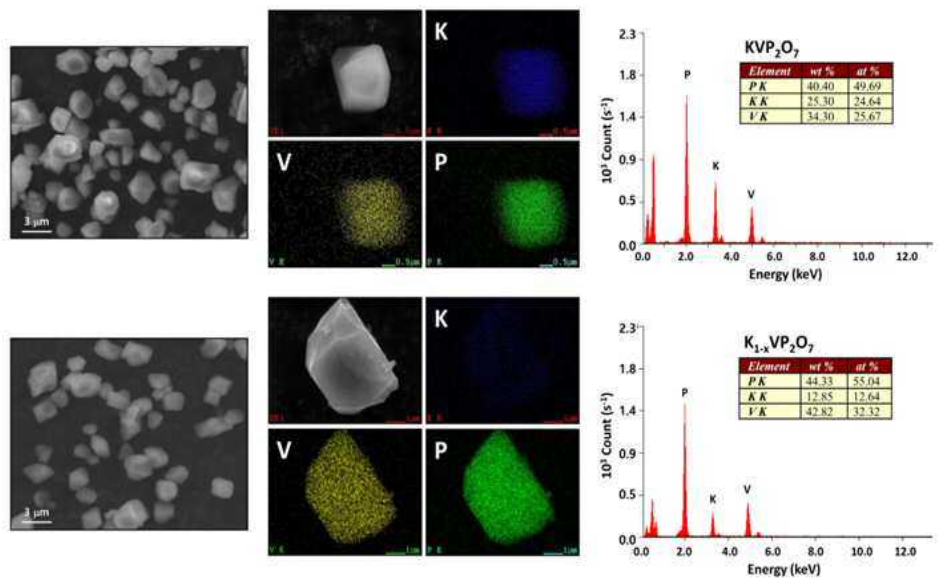
- 종래 기술의 문제점

 - 현재 이차전지 시장은 그린 에너지 산업의 핵심 성장 동력으로, 초고속 성장 추세에 있으며, 특히, 리튬 이차전지가 상용화되고 있음
 - 리튬 이차전지만으로는 수요에 부응할 수 없어, 리튬을 대체할 수 있는 포스트 이차전지의 개발이 필요하며, 차세대 이차전지로 나트륨 이차전지에 대한 연구가 활발히 진행되고 있음
 - 이에 대하여, 나트륨보다 풍부한 자원량을 가지며 낮은 표준 환원 전위를 갖는 칼륨 금속을 포함하는 칼륨 이차전지에 대한 개발이 진행됨

- 기술의 간략한 설명

 - 본 발명은 구조적 안정성이 우수한 터널 형태의 결정구조를 갖는 칼륨 이차전지용 양극 활물질을 제공함
 - 상기 양극 활물질은 충방전시 가역적인 상전이를 일으킴

- 대표도면

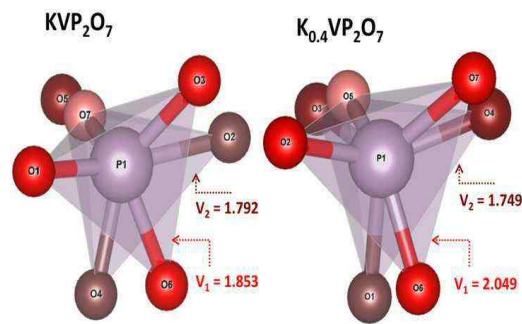


[본 발명에 따른 양극 활물질(KV_2O_7 과 이를 산화시킨 $K_{1-x}V_xO_7$)에 대한 FESEM 이미지 및 EDX 분석 결과]

■ 기술의 특징 및 우수성

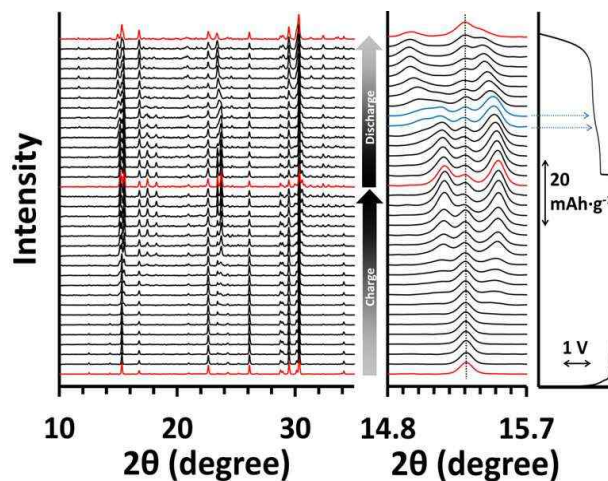
칼륨 이차전지용 양극 활물질 및 그 제조방법

- 본 발명의 칼륨 이차전지용 양극 활물질은, K, 전이금속, P 및 O를 포함하는 결정질 물질로, 충방전 과정에서 단사정계 결정구조(충전상태)와 삼사정계 결정구조(방전상태)의 가역적인 상전이가 동적으로 이루어지는 것
- 구체적으로, 상기 결정질 물질은 충전 상태에서의 조성이 하기와 같음 :
[화학식 1] $(K_{1-a}M1_a)(V_{1-b}M2_b)P_cO_d$
화학식 1에서, $0 \leq a \leq 0.1$, $0 \leq b \leq 0.7$, $1. \leq c \leq 2.2$, $6.8 \leq d \leq 7.2$ 이고, M1은 K를 제외한 알칼리금속 원소 중 1종 이상이고, M2는 Ti, Fe, Cr, Mo, Mn, Co, Ni, Al, La, Gd, Lu 중에서 선택되는 하나의 원소임
방전 상태에서의 조성은 하기와 같음 :
[화학식 2] $(K_{1-a}M1_a)(V_{1-b}M2_b)P_cO_d$
화학식 2에서, a,b,c 및 d는 화학식 1과 같으며, $0.55 \leq e \leq 0.65$ 임
- 구체적으로, 상기 결정질 물질은 충전 상태에서는 KVP_2O_7 이고, 방전상태에서는 $K_{1-x}VP_2O_7(0.55 \leq x \leq 0.65)$ 인 활물질임



[본 발명의 양극 활물질에 대한 충전 및 방전시의 형태의 차이를 보여주는 이미지]

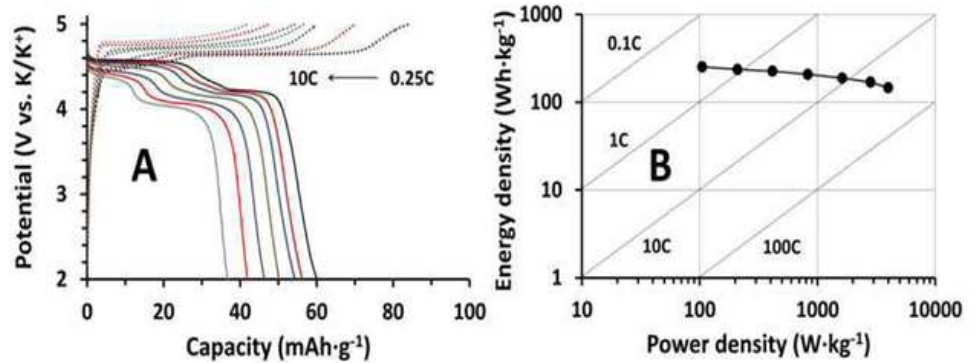
- 상기 결정질 물질은, 충전 상태에서의 공간그룹은 $P2_1/c$ 이고, 방전 상태에서의 공간그룹은 $\bar{P}1$ 으로 상전이가 발생하였으며, 이는 가역적으로 일어남을 확인할 수 있음



[본 발명에 따른 양극 활물질의 Synchrotron in situ XRD 분석]

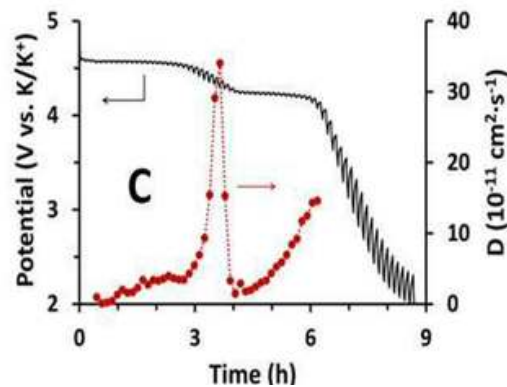
기술의 우수성

- 1회 사이클에서, 전류밀도가 0.25C에서 10C-rate로 증가시, 최대 방전용량이 60mAh^{-1} 에서 37mAh^{-1} 에 달함을 알 수 있음
- 그러나, 105W/kg 의 출력 밀도에서 253Wh/kg 의 에너지 밀도를 나타내며, 이는 188Wh/kg 으로 점진적으로 감소하여, 충방전 속도가 증가하여도 에너지 밀도가 우수하게 나타나는 것을 알 수 있음



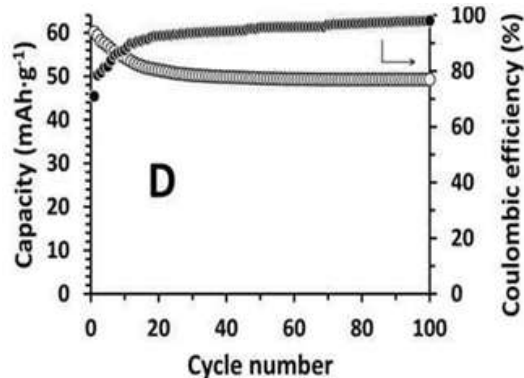
[본 발명에 따른 이차전지의 전류밀도 증가에 따른 충방전 프로파일 및 출력밀도에 따른 에너지 밀도를 나타낸 그래프]

- 본 발명에 따른 활물질 내 칼륨 이온의 빠른 확산성이 전지의 고에너지밀도를 갖게하는 요인임을 확인할 수 있음



[GITT를 사용하여 방전깊이가 있는 확산계수(Ds)의 진화의 조사를 나타낸 그래프]

- 본 발명에 따른 전지는 우수한 사이클 특성을 가짐을 확인할 수 있음



[본 발명에 따른 전지의 사이클 특성을 나타낸 그래프]

■ 기술의 우수성

- ① 본 발명의 칼륨 이차전지용 양극 활물질은 및 구조적 안정성을 가짐
- ② 상기 활물질은 칼륨 이온의 확산성이 우수한 것으로 나타남

| | |
|--------------|--|
| 종래기술 문제점 | <ul style="list-style-type: none"> • 이차전지의 시장은 급속도로 성장하고 있으나, 현재 상용화된 리튬 이차전지만으로는 수요를 감당하기 어려움 • 차세대 이차전지에 대한 연구가 필요한 실정 • 이에 따라, 나트륨보다 풍부한 자원량을 가지며 낮은 표준 환원 전위를 갖는 칼륨 금속을 포함하는 칼륨 이차전지에 대한 개발이 진행됨 |
| 해결방안 | <ul style="list-style-type: none"> • 터널형태의 결정구조를 가지며 구조적 안정성이 우수한 칼륨 이차전지용 양극 활물질을 제공함 |
| 기술의 특징 및 우수성 | <ul style="list-style-type: none"> • 칼륨 이차전지용 양극 활물질은 $(K_{1-a}M1_a)(V_{1-b}M2_b)P_cO_d$ ($0 \leq a \leq 0.1$, $0 \leq b \leq 0.7$, $1. \leq c \leq 2.2$, $6.8 \leq d \leq 7.2$이고, M1은 K를 제외한 알칼리금속 원소 중 1종 이상이고, M2는 Ti, Fe, Cr, Mo, Mn, Co, Ni, Al, La, Gd, Lu 중에서 선택되는 하나의 원소임)의 조성을 가짐 • 충방전시 가역적인 상전이를 일으킴 |

■ 기술의 효과

- 리튬 이차전지에 대한 차세대 이차전지를 제공할 수 있음
- 사이클 특성이 우수하며 고율 특성 및 고에너지 밀도 특성을 갖는 칼륨 이차전지를 제공할 수 있음

■ 기술의 완성도(TRL)

| 기초 연구 단계 | | 실험 단계 | | 시작품 단계 | | 제품화 단계 | | 사업화 |
|----------|---------|------------|-----------|----------|-----------|---------|-------------|------|
| 기본원리 파악 | 기본개념 정립 | 기능 및 개념 검증 | 연구실환경 테스트 | 유사환경 테스트 | 파일럿현장 테스트 | 상용모델 개발 | 실제 환경 최종테스트 | 상용운영 |
| | | | ● | | | | | |

■ 기술 키워드

| | |
|-------|---|
| 한글키워드 | 칼륨 이차전지, 전극 활물질, 터널 구조, 상전이 |
| 영문키워드 | Potassium based secondary battery, active material, tunnel type, phase transition |

03 기술적용분야 및 경쟁력

■ 기술의 적용분야

- 칼륨 이차전지
- 칼륨 이차전지용 전극 활물질

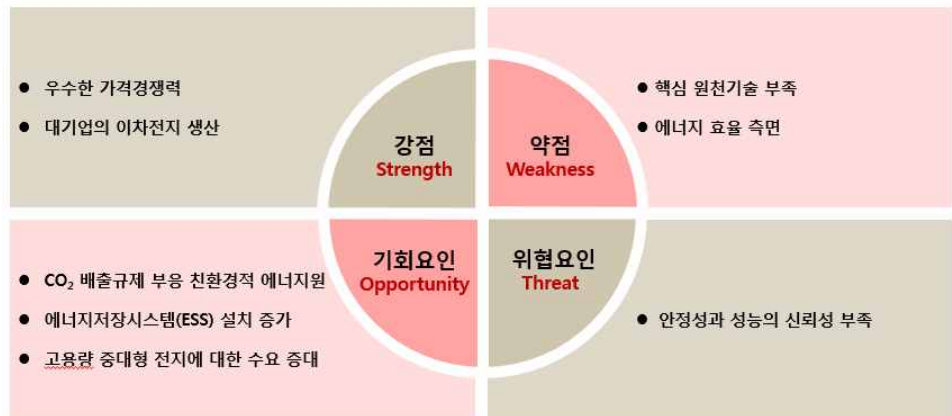
■ 기술경쟁력

- 차세대 리튬 이차전지로서, 칼륨 이차전지를 제공함에 따라 칼륨 이차전지의 상용화에 기여할 수 있음
- 포스트 리튬 이차전지의 대표주자인 나트륨 이차전지에 포함된 나트륨 금속 대비 칼륨 금속은 풍부한 자원량을 보임

■ 기술실시에 따른 기업에서의 이점

- 차세대 리튬 이차전지에 대한 대안으로 미래의 이차전지 시장의 후보군임
- ESS용과 같은 대용량 이차전지에 이용될 수 있음

[국내 칼륨 이차전지 분야의 SWOT 분석]



■ 특허현황

| 구분 | 발명의 명칭 | 출원번호 (출원일) | 등록번호 (등록일) | 출원 국가 |
|----|-----------------------------|---------------------------------|---------------|----------|
| 1 | 칼륨 이차 전지용 양극 활물질 및 칼륨 이차 전지 | 10-2017-0182017 (2017-12-28) | - | 한국 |



교수명 손 기 선 (디스커버리 실험실)
소속 세종대학교 공과대학 나노신소재공학과
E-mail kssohn@sejong.ac.kr
연구분야 LED 형광체,
 이차전지의 전극 소재

■ 대표 연구실적

Journals

- Identification of a narrow band red light-emitting phosphor using computational screening of ICSD: Its synthesis and optical characterization, Journal Of Alloys And Compounds 774 (2019)
- KCrS₂ Cathode with Considerable Cyclability and High Rate Performance: The First K⁺ Stoichiometric Layered Compound for Potassium-Ion Batteries , Small 14 (2018)
- Determination of possible configurations for Li_{0.5}CoO₂ delithiated Li-ion battery cathodes via DFT calculations coupled with a multi-objective non-dominated sorting genetic algorithm (NSGA-III) , Physical Chemistry Chemical Physics 20 (2018)
- Rb₃SiF₇:Mn⁴⁺ and Rb₂CsSiF₇:Mn⁴⁺ Red-Emitting Phosphors with a Faster Decay Rate, Chemistry Of Materials 30 (2018) Polyviologen as a high energy density cathode in magnesium-ion batteries, Electrochimica Acta 283 (2018)
- Deep-Learning Technique To Convert a Crude Piezoresistive Carbon Nanotube-Ecoflex Composite Sheet into a Smart, Portable, Disposable, and Extremely Flexible Keypad, Acs Applied Materials & Interfaces 10 (2018)
- KVP2O₇ as a Robust High-Energy Cathode for Potassium-Ion Batteries: Pinpointed by a Full Screening of the Inorganic Registry under Specific Search Conditions, Advanced Energy Materials 8 (2018)
- Reversible K⁺-Insertion/Deinsertion and Concomitant Na⁺-Redistribution in P³⁻-Na_{0.52}CrO₂ for High-Performance Potassium-Ion Battery Cathodes, Chemistry Of Materials 30 (2018)
- Reversible K⁺-Insertion/Deinsertion and Concomitant Na⁺-Redistribution in P³⁻-Na_{0.52}CrO₂ for High-Performance Potassium-Ion Battery Cathodes, Chemistry Of Materials 30 (2018)
- Simultaneous Suppression of Metal Corrosion and Electrolyte Decomposition by Graphene Oxide Protective Coating in Magnesium-Ion Batteries: Toward a 4-V-Wide Potential Window, Acs Applied Materials & Interfaces 9 (2017)
- An extremely simple macroscale electronic skin realized by deep machine learning, Scientific Reports 7 (2017)
- Nickel hydroxide nanoplatelets via dendrimer-assisted growth on graphene for high-performance energy-storage applications, Electrochimica Acta 248 (2017)
- Metaheuristics-Assisted Combinatorial Screening of Eu²⁺-Doped Ca-Sr-Ba-Li-Mg-Al-Si-Ge-N Compositional Space in Search of a Narrow-Band Green Emitting Phosphor and Density Functional Theory Calculations, Inorganic Chemistry 56 (2017) 등

학술발표

- Data mining for the inorganic crystal structure database (ICSD) to search for a red light-emitting phosphor, Phosphor Safari 2018(한국정보디스플레이학회 등), 2018-11
- Search for Cuboid Local Structures in the Inorganic Crystal Structure Database (ICSD) and Ensuing DFT Computation to identify a Red Light-Emitting Phosphor , EL2018(EL), 2018-09
- Discovery of Phosphors for Light Emitting Diode Applications Using Metaheuristics Computation, Phosphor Global Summit 2017(Phosphor Global Summit), 2017-03 등





세종대학교
산학협력단

UNIVERSITY