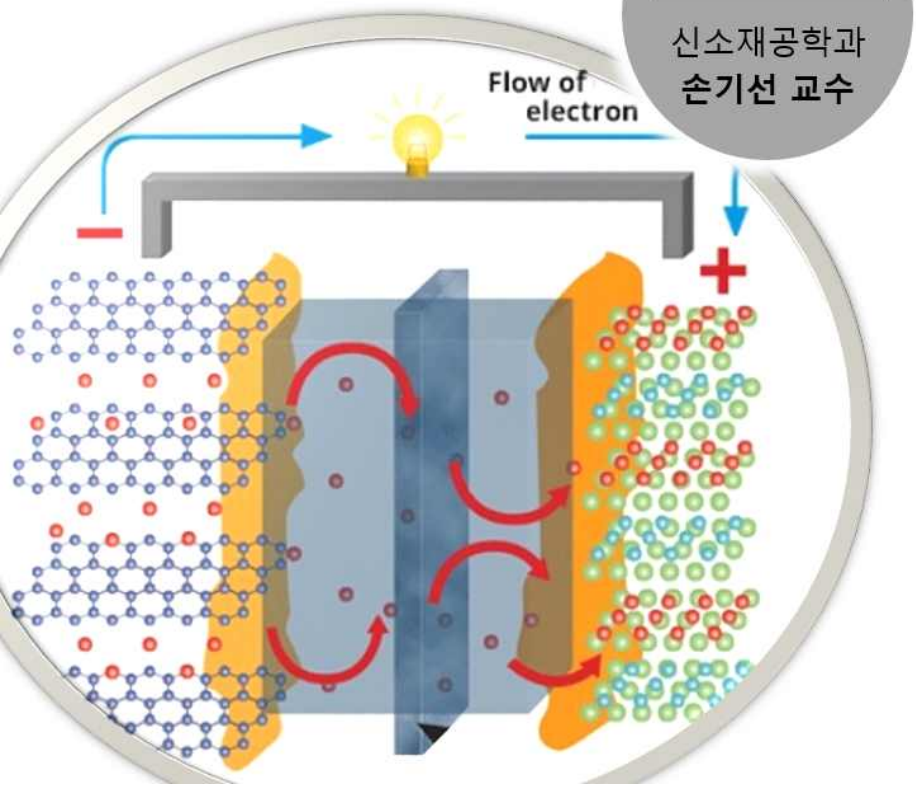
SEJONG

터널 결정구조의 칼륨 이차전지용 양극 활물질

본 기술은 칼륨 이차전지용 양극 활물질에 관한 것으로서,
$(K_{1-a}M1_a)(M2_{1-b}M3_b)P_cO_d$ 양극 활물질에 관한 것임

대표발명자

신소재공학과
손기선 교수



세종대학교
산학협력단

기술소개

01 발명의 명칭

칼륨 이차 전지용 양극 활물질, 이를 포함하는 칼륨 이차 전지

02 종래기술 대비 본 기술의 개요 및 특징

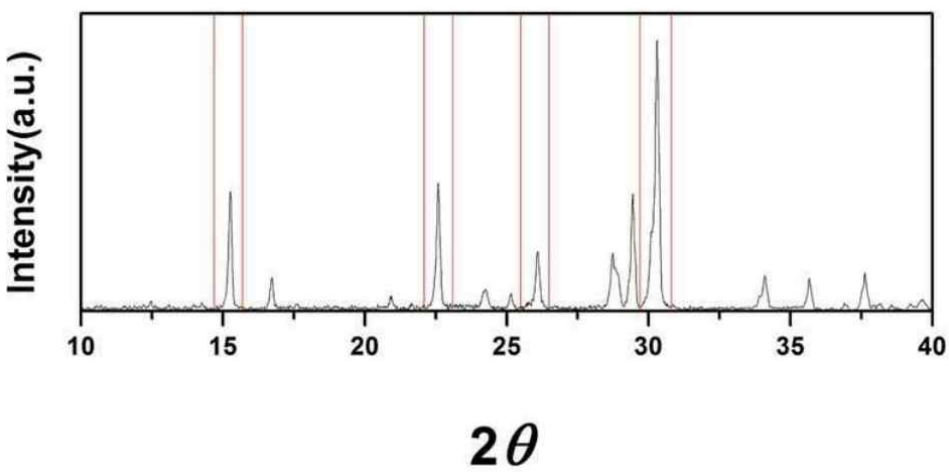
■ **종래 기술의 문제점**

- 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 활물질**을 제공함
- 상기 양극 활물질을 포함하는 이차전지는 사이클 특성이 우수함

■ **대표도면**



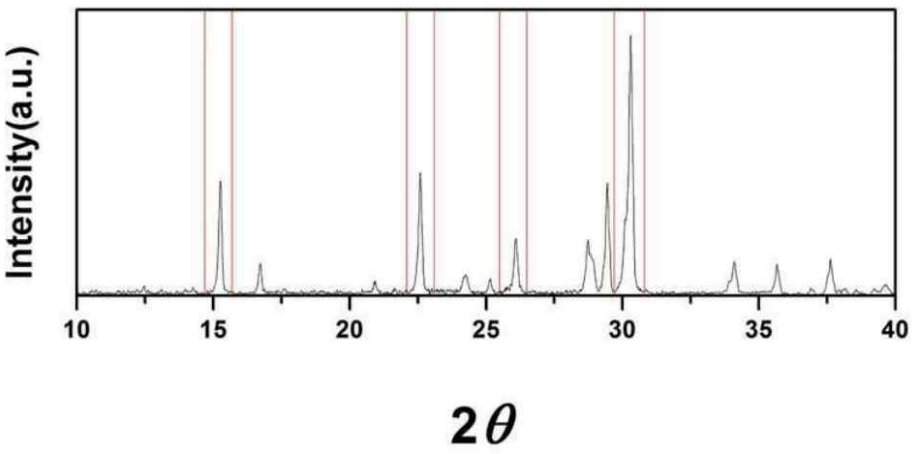
■ 기술의 특징 및 우수성

칼륨 이차전지용 양극 활물질 및 그 제조방법

- 본 발명의 칼륨 이차전지용 양극 활물질은,
  K, 전이금속, P 및 O를 포함하는 결정질 물질로,
  상기 물질의 X선 회절 패턴에 있어서, 가장 강도가 높은 회절 피크의 상대 강도를 100%로 했을 때, 상기 X선 회절 패턴의 브래그 각도 (2Θ) 가 14.7 ~ 15.7°, 22.1 ~ 23.1°, 25.5 ~ 26.5°, 29.7 ~ 30.8°인 범위에서 상대 강도 5% 이상인 회절 피크를 나타내는 상을 주상으로 포함하고,
  상기 양극 활물질의 조성을 가짐:
  [화학식 1] $(K_{1-a}M1_a)(M2_{1-b}M3_b)P_cO_d$
  화학식 1에서, M1은 K를 제외한 알칼리 금속원소 중 1종 이상,
  M2 및 M3는 전이금속 원소 중 1종 이상,
  $0 \le a \le 0.2$, $0 \le b \le 0.7$, $1.8 \le c \le 2.2$, $6.8 \le d \le 7.2$임

- 자세하게는, 상기 본 발명에 따른 칼륨 이차전지용 양극 활물질로서 결정질 물질은, KVP_2O_7, $KTiP_2O_7$, $KCrP_2O_7$, $KFeP_2O_7$, $KMoP_2O_7$ 중에서 선택된 1종 이상을 포함하는 것임

- 상기 활물질의 제조방법은, 상기 양극 활물질의 전구체(K_2CO_3, V_2O_5, TiO_2, $(NH_4)_2HPO_4$ 등)의 화합물들을 칭량하여 혼합한 후, 대기압 하에서 질소 분위기 하에서 700 내지 1100℃에서 소성시킨 후 분쇄시키는 것임



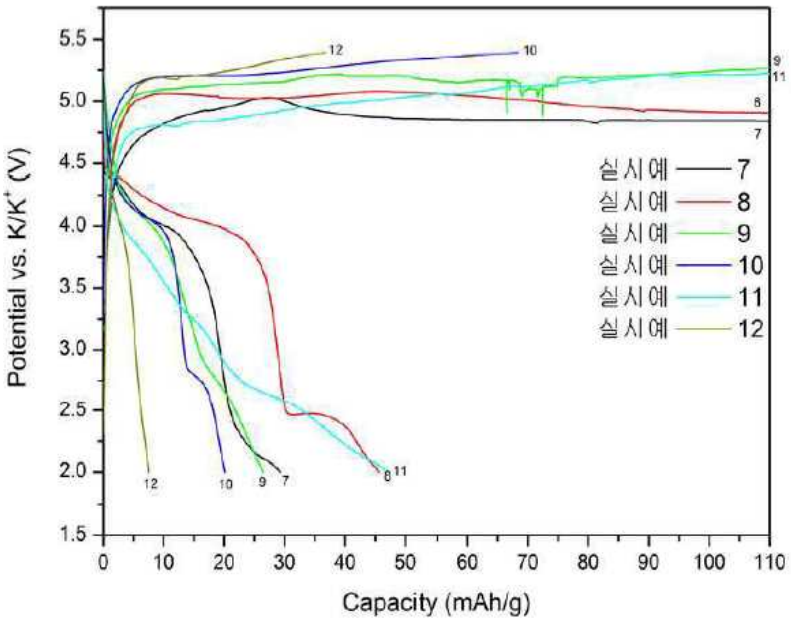
[본 발명에 실시예에 따라 합성된 양극 활물질의
선 회절 패턴의 브래드 각도를 나타낸 그래프]

기술의 우수성

실시예	1번째 사이클 용량(mAh/g)		10번째 사이클 용량(mAh/g)	
	충전	방전	충전	방전
7	174.3166	29.2949	50.7070	32.6744
8	270.5535	45.6723	49.9803	35.2444
9	253.4519	26.4667	36.9736	22.7879
10	68.4465	30.1204	31.3705	24.0434
11	187.1293	47.4293	49.6825	33.4117
12	36.7565	7.5408	10.6169	8.5019

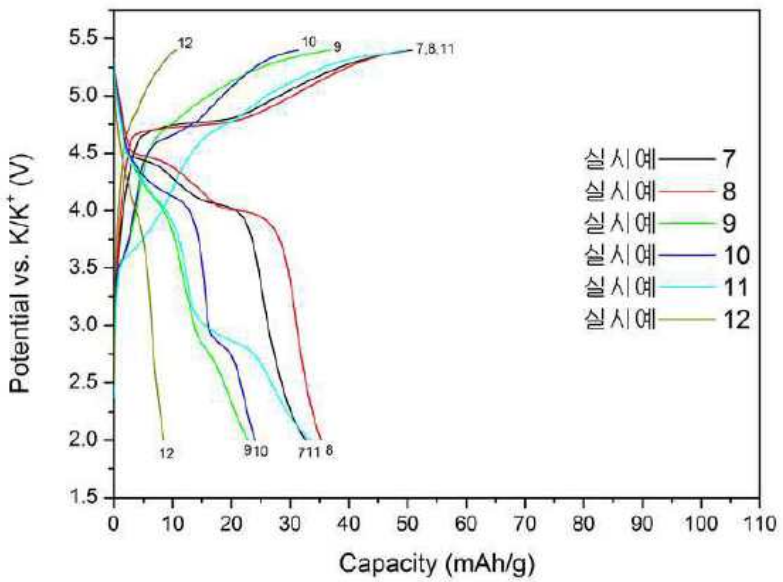
[하기 그래프에 따른 구체적인 용량 수치를 나타낸 표]

- 본 발명에 따라 제조된 양극 활물질의 일 실시예들에 대한 충방전 특성을 나타낸 그래프로, 특히, 첫 번째 충방전 결과를 나타낸 것임
- 방전 용량이 50mAhg-1 이상인 실시예가 존재함을 확인할 수 있음(전지특성 평가 조건은, 12mAg^{-1}의 C-rate에서, 2.0 내지 5.4V의 cut off로 실시함)



[본 발명에 실시예들에 따라 합성된 양극 활물질의
첫 번째 충방전 결과를 나타낸 그래프]

- 본 발명에 따라 제조된 양극 활물질의 일 실시예들에 대한 충방전 특성을 나타낸 그래프로, 특히, 열 번째 충방전 결과를 나타낸 것임
- 상기에 따른 첫 번째 충방전 실시에 따른 방전용량 대비 감소율이 낮아, 방전용량 유지율이 우수함을 알 수 있음(전지특성 평가 조건은, 12mAg^{-1}의 C-rate에서, 2.0 내지 5.4V의 cut off로 실시함)



[본 발명에 실시예들에 따라 합성된 양극 활물질의
열 번째 충방전 결과를 나타낸 그래프]

■ 기술의 우수성

① 본 발명의 칼륨 이차전지용 양극 활물질은 충방전 과정에서도 구조적 안정성을 유지할 수 있음

② 특히, 방전용량 유지율이 우수한 칼륨 이차전지를 제공함

종래기술 문제점	• 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	• **층상형태의 결정구조**를 가지며 구조적 안정성이 우수한 칼륨 이차전지용 양극 활물질을 제공함
기술의 특징 및 우수성	• 칼륨 이차전지용 양극 활물질은 가장 강도가 높은 회절 피크의 상대 강도를 100%로 했을 때, 상기 X선 회절 패턴의 브래그 각도 (2Θ) 가 14.7 ~ 15.7°, 22.1 ~ 23.1°, 25.5 ~ 26.5°, 29.7 ~ 30.8°인 범위에서 상대 강도 5% 이상인 회절 피크를 나타내는 상을 주상으로 포함함 • 양극 활물질의 조성 : $(K_{1-a}M1_a)(M2_{1-b}M3_b)P_cO_d$ (M1은 K를 제외한 알칼리 금속원소 중 1종 이상, M2 및 M3는 전이금속 원소 중 1종 이상, $0\le a\le 0.2$, $0\le b\le 0.7$, $1.8\le c\le 2.2$, $6.8\le d\le 7.2$임 ($0.35\le x\le 1$이고, $0.95\le y\le 1.05$)임)

■ 기술의 효과

- 리튬 이차전지에 대한 차세대 이차전지를 제공할 수 있음
- 사이클 안정성과 우수한 고율 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, 터널형 구조
영문키워드	Potassium based secondary battery, active material, tunnel type

03 기술적용분야 및 경쟁력

■ **기술의 적용분야**

- 칼륨 이차전지
- 칼륨 이차전지용 전극 활물질

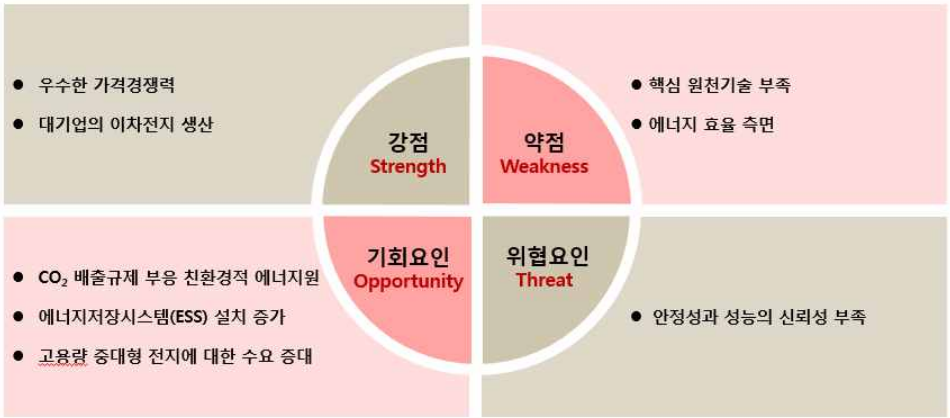
■ **기술경쟁력**

- 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**

- 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, 이를 포함하는 칼륨 이차 전지	10-2017-0030364 (2017-03-10)	10-1938962 (2019-01-09)	한국
2	칼륨 이차 전지용 양극 활물질, 이를 포함하는 칼륨 이차 전지	18763829.1 (2018-12-17)	-	유럽
3	칼륨 이차 전지용 양극 활물질, 이를 포함하는 칼륨 이차 전지	16/310,849 (2018-12-18)	-	미국
4	칼륨 이차 전지용 양극 활물질, 이를 포함하는 칼륨 이차 전지	-	-	일본

연구자 소개

INVENTOR

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 Li0.5CoO2 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 P ' 3-Na0.52CrO2 for High-Performance Potassium-Ion Battery Cathodes, Chemistry Of Materials 30 (2018)
- Reversible K+-Insertion/Deinsertion and Concomitant Na+-Redistribution in P ' 3-Na0.52CrO2 for High-Performance Potassium-Ion Battery Cathodes, Chemistry Of Materials 30 (2018)
- Simultaneous Suppression of Metal Corrosion and ElectrolyteDecomposition by Graphene Oxide Protective Coating inMagnesium-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 igorganic crystal strucure 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 Phospor , EL2018(EL), 2018-09
- Discovery of Phosphors for LightEmitting Diode Applications UsingMetaheuristics Computation, Phosphor Global Summit 2017(Phosphor Global Summit), 2017-03 등

SEJONG UNIVERSITY
Industry-Academy
Cooperation Foundation

UNIVERSITY

세종대학교
산학협력단

세종대학교 산학협력단 기술이전센터
05006 서울특별시 광진구 능동로 209 광개토관 1002호
Tel. 02-3408-4097 E-mail. patent@sejong.ac.kr