



ルチル型モリブデン酸化物の EXAFS 測定

片山尚幸
名古屋大学 工学研究科

キーワード：ルチル構造、Li インターカレーション、多重結合

1. 背景と研究目的

ルチル型構造はトンネル状の空孔を有しており、Li イオンの挿入が可能であることから、古くから Li イオン電池の正極材としての研究が盛んにおこなわれてきた。本研究では、Li イオンのインターカレーションに伴う物性・構造変化を明らかにすることを目的として研究を行っている。今回取り上げる Li_xMoO_2 系では、Li 量を 0 から 1 へと制御する過程で、monoclinic-orthorhombic-monoclinic の 2 度の相転移が生じ、エンドメンバーの LiMoO_2 は絶縁体となり、磁化率に大きな温度依存性が現れる^[1]。本研究では、この磁化率の変化を Mo-Mo 間の多重結合発達に由来するものと考え、結合発達に伴う Mo-Mo 間距離の変化に関する知見を得ることを目的として、低温での EXAFS 実験を行った。

2. 実験内容

LiMoO_2 に加えて MoO_2 , $\text{Li}_{0.5}\text{MoO}_2$ の 3 種の試料を準備し、適量の BN と混ぜ合わせたペレット試料をそれぞれ作成した。空気中で不安定であることから、表面にアピエゾン N グリスを塗布し、カプトンテープでシールを行った。シールは自作の治具を用いて固定し、クライオスタット中に導入した。実験は 20 K から昇温させ、40 K 刻みで測定を行った。実験には Mo の K 吸収端(20.0 keV)を利用した。

3. 結果および考察

LiMoO_2 の Mo-Mo 間距離の温度変化調査が最大の目的であったが、サンプル輸送中に空気との反応が生じた結果、Li が抜けた MoO_2 と同様のスペクトルを示した。Monoclinic 構造を持つ MoO_2 と orthorhombic 構造を持つ $\text{Li}_{0.5}\text{MoO}_2$ では、下に示すように Mo-Mo 間距離を反映して現れる 2.1 Å 程度のピークに顕著な温度依存性の差が観測された(下図)。 LiMoO_2 については今後、非弾性中性子散乱をはじめとしたいくつかの実験を予定しており、それらの測定結果の進捗状況を勘案しながら、再測定の必要性について検討したい。

