



ナトリウム電池用新規電極活物質の構造解析

谷端 直人・前田将基・武田はやみ・中山将伸
名古屋工業大学

キーワード：ナトリウムイオン電池，新規正極材料，配向

1. 背景と研究目的

エネルギー問題の深刻化に伴い、低コスト・高エネルギー密度を有するナトリウムイオン二次電池の開発が期待されている。我々の研究室では、ナトリウムイオン電池用新規正極材料として $\text{Na}_2\text{V}_3\text{O}_7$ が有望であることを発見した。 $\text{Na}_2\text{V}_3\text{O}_7$ の構造は単結晶構造解析 [1] から明らかにされているが、反射法を用いた粉末 X 線回折法では、既報の回折パターンとの強度比と異なる回折パターンが得られた。そこで本実験では、放射光を用いた透過法による X 線回折測定により合成した $\text{Na}_2\text{V}_3\text{O}_7$ の回折データの取得を目指した。

2. 実験内容

固相反応により合成した $\text{Na}_2\text{V}_3\text{O}_7$ 粉末をアルゴン雰囲気グローブボックス中で、直径 0.3 mm のポリシリケートガラスキャピラリーに充填とシールを行った。その試料に対し、あいちシンクロトロン光センター ビームライン BL5S2 において、常温で透過法により回折測定を行った。X 線のエネルギーは 15.5 keV とした。

3. 結果および考察

Fig. 1 に示すように、 $\text{Na}_2\text{V}_3\text{O}_7$ 粉末の反射法による X 線回折パターンにおいては、既報のパターン (ICSD #88780) と回折位置は一致したが、ピーク強度比が異なる結果であった。一方、今回測定した透過法による X 線回折パターンにおいては、112 面と 211 面や、220 面と 203 面の反射由来のピーク強度比が既報のものに近くなった。これらのことから、反射法による X 線回折測定時、試料は c 軸方向に配向していたことがわかった。一方、100 面と 200 面の反射由来のピークに関しては、依然として既報のパターンと異なる強度比を示した。この原因は、作製法の違いによる Na 欠損具合の違いを反映していると考えており、今後リートベルト解析により明らかにする予定である。

4. 参考文献

1. Millet, P.; Henry, J.Y.; Mila, F.; Galy, J., *J. Solid State Chem.* (1999) 147, p676-p678.

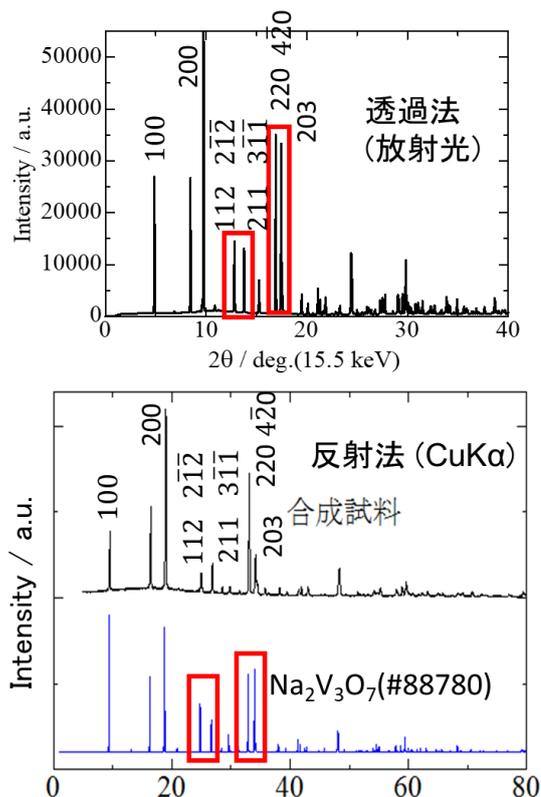


Fig. 1. $\text{Na}_2\text{V}_3\text{O}_7$ 粉末の透過法と反射法によって得られた X 線回折パターンと ICSD データベースからシミュレートした X 線回折パターン。