



## P2型層状ルテニウム酸化物の結晶構造解析

西村 真一<sup>1,2</sup>, 大久保 将史<sup>1</sup>, 山田 淳夫<sup>1,2</sup>

1 東京大学, 2 京都大学

キーワード：蓄電池、ナトリウムイオン電池

### 1. 背景と研究目的

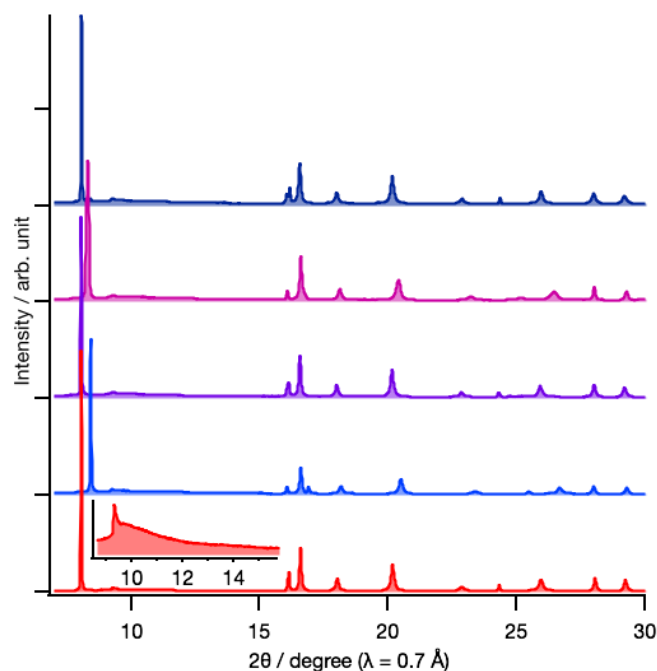
電力の効率的な運用や電気自動車への転換が求められる中、蓄電池への要求は日々高まっている。リチウムイオン電池を中心とした高エネルギー密度を誇る電池についても、更に大きな容量を実現する試みが継続的に行われている。電池の容量は電極活物質の特性によって規定されてしまうため、さらに高エネルギー密度な電池の設計のためには、電極材料そのものを改良する必要がある。特に容量の進歩が遅れている正極側については、層状構造を有するコバルト酸化物を中心とした、層状構造を基本とした酸化物群が特に優れた特性を発揮するため精力的に研究されてきた。我々は、その層状酸化物の反応容量を更に向上させるアプローチとして酸素の電荷補償能が複雑に絡み合う物質系に着目し、特に優れた特性を示すモデルケースとしてルテニウム酸化物を取り上げ、その構造が電極特性をいかに支配するのか、体系的な研究を進めてきた。本実験では、これまでの研究対象としてきた O3 型とよばれる構造を有する  $\text{Li}_2\text{RuO}_3/\text{Na}_2\text{RuO}_3$  を基本とした物質<sup>1)</sup>とは異なる、O2型化合物を対象として結晶構造解析を行い、その電池特性との相関を明らかにすることを目的としている。

### 2. 実験内容

合成した試料粉末及び電気化学反応後の電極をそれぞれ外径 0.3 mm のほうけい酸ガラスキャピラリーに充填し封止したものを測定試料とした。測定波長は 0.7 Å とし、3 分の露光を 2 回行ったものを積算し、一次元の回折データとした。

### 3. 結果および考察

一次元化処理まで行った O2型ルテニウム酸化物の粉末回折図形を Fig.1 に示す。基本的に六方晶の O2型酸化物に由来するブラッグ反射が観測され、充放電を行っても他の構造への相転移は見られなかった。また、初期状態において見られるルテニウム層内の蜂の巣型超格子が積層不整を伴って存在していることに由来する散漫散乱が確認された。充放電中も若干強度は弱まるものの、超構造は存在したまま反応が進行していることが確認された。今後、Rietveld 法などのプロファイルフィッティングを用いて更に解析を進めていく。



### 4. 参考文献

1. Mortemard de Boisse, B. et al. *Nat Commun* **10**, 2185 (2019).

Fig.1 O2型層状ルテニウム酸化物の粉末回折図形。下から、初期状態、初回充電後、初回放電後、二回目の充電後、2回目の放電後の順。