



蓄電材料の結晶構造解析

小林 弘明
北海道大学

キーワード：ナトリウムイオン電池，二次電池正極，Na 過剰酸化物

1. 背景と研究目的

リチウムイオン電池の高まる高性能化需要を受け、レアメタルフリー、高エネルギーな蓄電池システムが求められている。ポストリチウムイオン電池としてナトリウムをキャリアとするナトリウムイオン電池は、正極材料の選定によりレアメタルフリー蓄電池を創出可能である。我々のグループでは、ナトリウムと鉄から構成される酸化物、特に多量のナトリウム脱挿入が見込めるナトリウム過剰鉄酸化物 Na_5FeO_4 に着目し、構造評価およびレドックス反応機構の追跡をあいち SR にて測定、分析を進めている。今回の実験では、 Na_5FeO_4 の結晶構造解析を行った。

2. 実験内容

Na_2O と NaFeO_2 を $\text{Na/Fe} = 5/1$ (mol/mol) の比で混合し、Ar 下で焼成して合成した。得られたサンプルは Ar 置換グローブボックス下でキャピラリーに封入し、16 keV で放射光 XRD 測定を行った。

3. 結果および考察

Fig. 1 に焼成によって得られた Na_5FeO_4 の放射光 XRD パターンを示す。類似組成である Li_5FeO_4 では逆蛍石型構造が得られたが、 Na_5FeO_4 では逆蛍石型構造（ α 、 β 型）とは異なる γ 型が得られた。第一原理計算から室温では β 型が再安定構造だが 430 K 以上では γ 型が最安定構造と報告^[1]されており、高温安定相が凍結された状態で得られたと考えられる。今回の合成条件では Na 揮発により他組成の Na-Fe 酸化物が不純物相として含まれることが明らかとなったため、合成条件へのフィードバックを行う。

4. 参考文献

1. R. V. Thøgersen *et al.*, *RSC Adv.* 12, 17410 (2022).

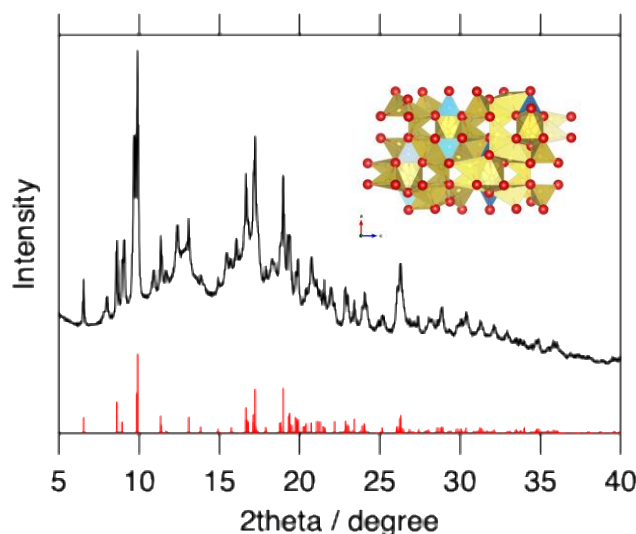


Fig.1 放射光 XRD パターンと γ - Na_5FeO_4 の結晶構造(PDF#01-970-1269, VESTA にて出力)