



## 元素置換によるチタンニオブ酸化物の構造変化

須田 耕平<sup>1</sup>, 成實 俊介<sup>2</sup>, 柳 仙妹<sup>2</sup>, 是津 信行<sup>2</sup>

1 国立大学法人東海国立大学機構名古屋大学, 2 国立大学法人信州大学

キーワード：全固体電池, XAFS

### 1. 背景と研究目的

チタンニオブ酸化物 ( $\text{TiNb}_2\text{O}_7$ ) はリチウムイオン二次電池の負極材料であり、現行の黒鉛負極と同等の理論容量を示す上に、作動電位は黒鉛負極よりも高く安全性に優れる。この  $\text{TiNb}_2\text{O}_7$  は多元素置換により位相界面の安定性向上が期待できる。今回は、 $\text{TiNb}_2\text{O}_7$  の一部を Ta で置換したサンプルに対して XAFS を測定し、Ta 置換による微細構造変化を評価した。

### 2. 実験内容

サンプルは  $\text{TiNb}_2\text{O}_7$ 、 $\text{TiNb}_{1.5}\text{Ta}_{0.5}\text{O}_7$ 、 $\text{TiNbTaO}_7$ 、 $\text{TiNb}_{0.5}\text{Ta}_{1.5}\text{O}_7$ 、 $\text{TiTa}_2\text{O}_7$  の 5 種類であり、全て窒化ホウ素と混合してペレット化した。測定は Ti K 吸収端、Ta L3 吸収端、Nb K 吸収端に対して、全て透過法で実施した。

### 3. 結果および考察

Ta L3 吸収端の結果について報告する。Fig. 1 は、 $\text{TiTa}_2\text{O}_7$ 、 $\text{TiNb}_{0.5}\text{Ta}_{1.5}\text{O}_7$ 、 $\text{TiNbTaO}_7$ 、 $\text{TiNb}_{1.5}\text{Ta}_{0.5}\text{O}_7$ 、 $\text{Ta}_2\text{O}_5$  ( $\text{Ta}_2\text{O}_5$  はあいち SR の参照試料を使用) の 5 サンプルの動径構造関数である。 $\text{TiNb}_2\text{O}_7$  に Ta を置換していくと、赤く塗った領域のピークは減少し、青く塗った領域のピークは増加した。この結果から、 $\text{TiNb}_2\text{O}_7$  に Ta を置換すると第二配位圏の原子間距離が長くなる可能性が示唆された。

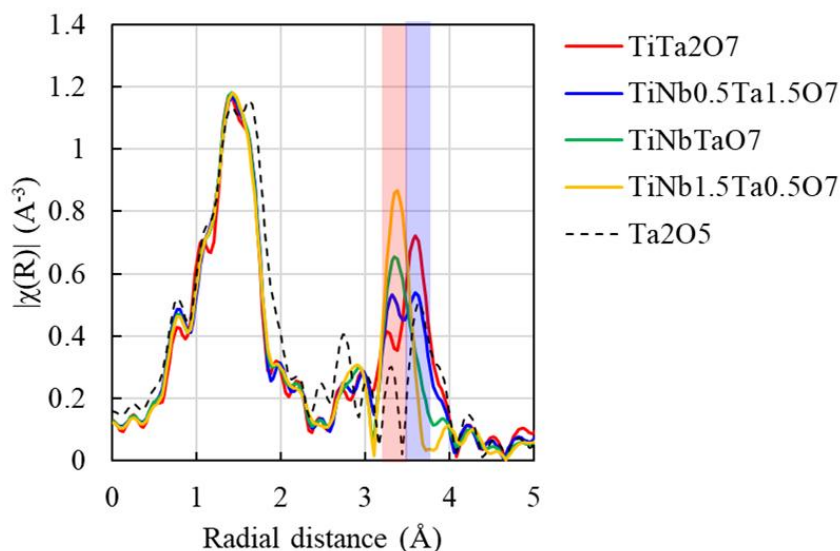


Fig. 1 Ta L3 吸収端の動径構造関数