17p-A2-12

コンプトン散乱による$Li_xMn_2O_4$(x=0.5,1.0)の電子状態の測定

Measurement of Electron States in Li_xMn_2O4 (x=0.5, 1.0) by Compton Scattering

群馬大 [1], Northeastern Univ. [2], 京大 [3], JASRI[4], °櫻井浩 [1], 鈴木宏輔 [1], 郷直人 [1], B. Barbiellini[2],
A. Bansil[2], 折笠有基 [3], 内本喜晴 [3], 伊藤真義 [4], 櫻井吉晴 [4]
Gunma Univ. [1], Northeastern Univ. [2], Kyoto Univ. [3], JASRI[4]
E-mail: sakuraih@gunma-u.ac.jp

スピネル構造のマンガン酸化物である $Li_xMn_2O_4$ は Li イオン電池の正極として研究が進められている。携帯機器などに利用されている $LiCoO_2$ 酸化物系にくらべて毒性が低く安価であることから、一部実用化されている[1]。しかしながら、充放電サイクルによる容量の低下、高温環境下での Mn の溶出[2]などの課題がある。これらは、Mn_2O_4 が Li 化されることで生じる Mn^{3+} の Jahn-Teller 効果によって、局所的な格子歪おきるためと考えられてきた。Berg ら[3]、Grechnev[4]らの理論計算は、Li 化に伴い Mn*3d* の *t2g* バンドが充てんされると報告しており Li 化によって生じた Mn^{3+} の Jahn-Teller 効果を支持する。一方、Aydinol ら[5]と Liu ら[6]は Li 化によって酸素の *2p* バンドが充てんされ Mn サイトの価数変化はないと指摘している。本研究では、$Li_xMn_2O_4$ の Li 化に伴う電子状態の変化をコンプトン散乱で測定した。その結果、$Li_xMn_2O_4$ の Li 化に伴い酸素の *2p* バンドが充てんされ、同時に Mn*3d* 電子の局在状態が弱くなることを見出した。

[1] 鳶島 真一、次世代自動車用リチウムイオン電池の設計法 (設計技術シリーズ)、科学技術出版、2013
[2]電池用活物質、東レリサーチセンター、2013
[3] H. Berg, K. Goransson, B. Nolang, and J. O. Thomas, J. Mater. Chem. 9, 2813-2820 (1999).
[4] G. E. Grechnev, R. Ahuja, B. Johansson and O. Eriksson, Phys. Rev. B 65, 174408 (2002).
[5] M. K.Aydinol and G. Ceder, J. Electrochem. Soc. 144, 3832-3835 (1997).
[6] Y. Liu, T. Fujiwara, H. Yukawa and M. Morinaga, Solid State Ionics 126, 209-218 (1999).

© 2013 年　応用物理学会