

新規三元系化合物 $\text{LiSi}_{1-x}\text{Ge}_x$ の合成

Synthesis of $\text{LiSi}_{1-x}\text{Ge}_x$ as a Novel Ternary Compound

岐大工¹ ○(M1)池本 彰吾¹, 杉浦 優太郎¹, ヒマンシュ S ジャ¹, 大橋 史隆¹, 久米 徹二¹

Gifu Univ.¹, S. Ikemoto¹, Y. Sugiura¹, H. S. Jha¹, F. Ohashi¹, T. Kume¹

E-mail: y4526003@edu.gifu-u.ac.jp

14 族元素である Si および Ge 系材料は、半導体としての応用のみならず、最近では大容量リチウムイオン電池の陰極材料としても注目される。Li-Si 又は Li-Ge の二元系化合物には、組成比の異なるいくつかの化合物が存在する。組成比 1:1 の LiSi 、 LiGe は 3 配位の Si や Ge の共有結合ネットワークを有する興味深い結晶構造を示す。これまでに Li-Si-Ge 三元系化合物として $\text{Li}_{17}\text{Si}_{4-x}\text{Ge}_x$ 、 $\text{Li}_7\text{Si}_{3-x}\text{Ge}_x$ 、 $\text{Li}_{12}\text{Si}_{7-x}\text{Ge}_x$ の合成例[1-3]があるが、 $\text{LiSi}_{1-x}\text{Ge}_x$ については報告がない。本研究では、熱処理による LiGe の合成技術を確立し、Ge の一部を Si に置換することを試みたので報告する。

$\text{LiSi}_{1-x}\text{Ge}_x$ の合成は、出発材料である Li 小片と Si, Ge の粉末を所定のモル比率で混合し、Ar 雰囲気中での熱処理により行った。このとき Si に対する Ge の仕込み比を 70% から 100% の間で変化させると共に、700°C から 1000°C の各熱処理温度で処理を行った。試料は粉末 X 線回折(リガク、SmartLab)により評価した。

図 1 は Ge の仕込み比を 100% から 70% の間で変化させ、1000°C で合成した試料の XRD パターンである。すべての試料において、 LiGe (100%) と同様な XRD ピークを確認した。(70% では、異なる組成の 3 元化合物が観測されている。) また、Ge の仕込み比が減少するに従い、ピークが高角側へシフトし、格子体積が $553.5(1) \text{ \AA}^3$ から $549.8(2) \text{ \AA}^3$ に減少したことが認められた。体積減少は Si の置換によるものであり、 $\text{LiSi}_{1-x}\text{Ge}_x$ の合成に成功したと言える。さらに、格子体積がベガード測に従っていると仮定すると、70% の仕込み比の場合でも Ge 組成比 x は 0.92 あると考えられる。

【謝辞】本研究は、科研費(JP16K21072, JP17H03234)の助成により行われました。

【参考文献】

- [1] M. Zeilinger *et al.*, Dalton Trans, **43**, 14959-14970 (2014).
- [2] L. M. Scherf *et al.*, Z. Anorg. Allg. Chem, **642**, 20, 1143-1151 (2016).
- [3] S. Wang *et al.*, J. Phase Equilib. Diffus, **39**, 315-323 (2018).

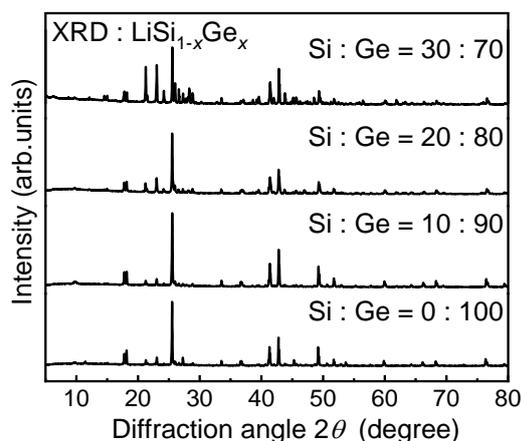


図 1 Ge 仕込み比を 70 ~ 100% として 1000°C の熱処理で合成した $\text{LiSi}_{1-x}\text{Ge}_x$ の XRD パターン