

# QENS 測定による $\text{Na}_x\text{CoO}_2$ の Na イオン拡散解析

## Na diffusion in $\text{Na}_x\text{CoO}_2$ detected by QENS

野崎 洋<sup>1\*</sup>, 梅垣 いづみ<sup>1</sup>, 竹内 恒博<sup>2</sup>, 蒲沢 和也<sup>3</sup>,  
山田 武<sup>4</sup>, 柴田 薫<sup>4</sup>, 杉山 純<sup>1</sup>

1 豊田中研, 2 名大(現豊田工大), 3 CROSS 東海, 4 原研

層状構造を有する  $\text{Na}_x\text{CoO}_2$  は Na イオン伝導体として機能し, Na イオン電池材料として利用可能である[1,2]。我々はこれまでにミュオンスピン緩和法 ( $\mu\text{SR}$ ) により, 250-300K 以上で  $\text{Na}^+$  が拡散することを示した[3]。ここで,  $\text{Na}^+$  の拡散距離と拡散係数を詳細に調べるために, 中性子準弾性散乱 (QENS) 測定を行った。 $\text{Na}_x\text{CoO}_2$  ( $x = 0.5, 0.7$ ) 粉末試料を固相反応法で合成した。J-PARC の BL-2 (DNA) において 200 K - 700 K の温度範囲で散乱スペクトル  $S(Q, E)$  を測定した。

図 1 に 702 K における  $S(Q, E)$  を示す。弾性散乱ピーク強度が減少すると共に, 準弾性スペクトルが観測された。全散乱強度に対する弾性散乱強度 (EISF) の  $Q$  依存性から  $\text{Na}^+$  のジャンプ距離は 1.97 と見積もられた。これは, 最隣接 Na サイト間距離 1.63 と近く,  $\text{Na}^+$  は主に最隣接間サイトをジャンプすると考えられる。QENS スペクトルの半値幅  $\Gamma$  から自己拡散係数  $D_{\text{Na}}$  を見積もったところ, 500K で  $\sim 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{s}$  だった。

参考文献:

[1] C. Delmas, J.-J. Braconnier, C. Fouassier, P. Hagenmuller, *Solid State Ionics*, **3/4**, 165 (1981).

[2] R. Berthelot, D. Carlier, and C. Delmas, *Nature Mater.* **10**, 74 (2011).

[3] M. Månsson and J. Sugiyama, *Phys. Scr.* **88**, 168509 (2013).

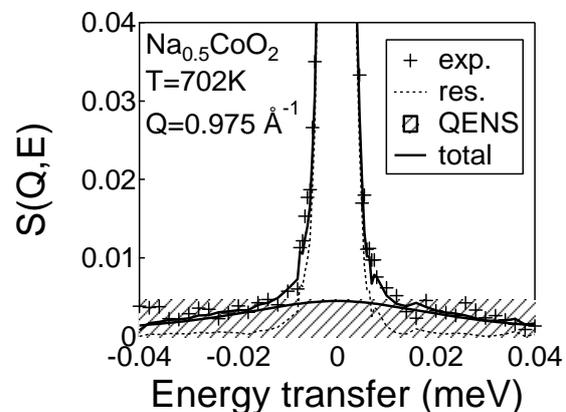


Fig. 1 702 K における  $\text{Na}_{0.5}\text{CoO}_2$  の散乱スペクトル  $S(Q, E)$ 。斜線が準弾性散乱を表す。

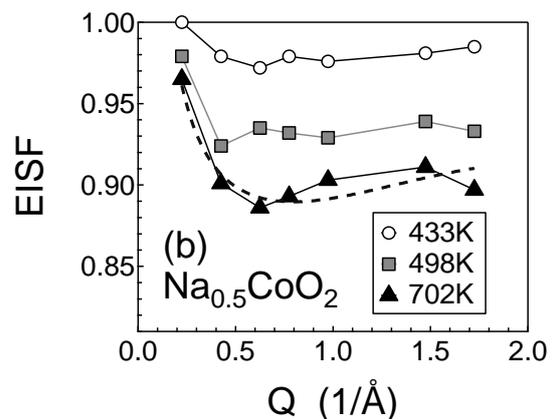


Fig. 2 全散乱強度に対する弾性散乱強度の割合。破線はジャンプ拡散モデルによるフィッティング。