

QENS 測定による Na_xCoO_2 の Na イオン拡散解析

Na diffusion in Na_xCoO_2 detected by QENS

野崎 洋^{1*}, 梅垣 いづみ¹, 竹内 恒博², 蒲沢 和也³,
山田 武⁴, 柴田 薫⁴, 杉山 純¹

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 Na_xCoO_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 (μSR)により, 250-300K 以上で Na^+ が拡散することを示した[3]。ここで, 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。 Na_xCoO_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 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, 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 Γ から自己拡散係数 D_{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).

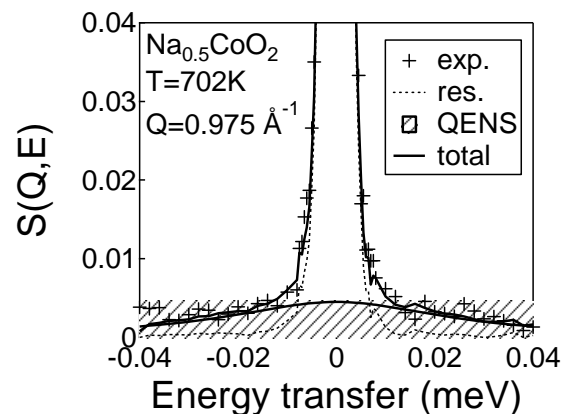


Fig. 1 702 K における $\text{Na}_{0.5}\text{CoO}_2$ の散乱スペクトル $S(Q, E)$ 。斜線が準弾性散乱を表す。

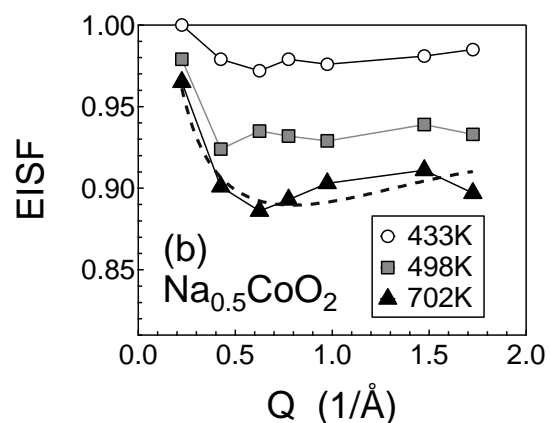


Fig. 2 全散乱強度に対する弾性散乱強度の割合。破線はジャンプ拡散モデルによるフィッティング。