 MLF Experimental Report	提出日 Date of Report
課題番号 Project No. 2008G0026 実験課題名 Title of experiment 次世代リチウムイオン電池用活物質の結晶構造解析 実験責任者名 Name of principal investigator 遠藤 大輔 所属 Affiliation (株)ジーエス・ユアサ コーポレーション	装置責任者 Name of responsible person 石垣 徹 装置名 Name of Instrument/(BL No.) iMATERIA(BL20) 実施日 Date of Experiment 2009 年 10 月 19 日

試料、実験方法、利用の結果得られた主なデータ、考察、結論等を、記述して下さい。(適宜、図表添付のこと)
 Please report your samples, experimental method and results, discussion and conclusions. Please add figures and tables for better explanation.

1. 試料 Name of sample(s) and chemical formula, or compositions including physical form.
リチウムイオン電池用正極活物質 $\text{LiCo}_{1/3}\text{Ni}_{1/3}\text{Mn}_{1/3}\text{O}_2$

2. 実験方法及び結果 (実験がうまくいかなかった場合、その理由を記述してください。) Experimental method and results. If you failed to conduct experiment as planned, please describe reasons.
<p>固相法により合成した $\text{LiCo}_{1/3}\text{Ni}_{1/3}\text{Mn}_{1/3}\text{O}_2$ について、iMATERIA(BL20)を用いた粉末中性子回折測定をおこなった。その結果、得られた回折図形は六方晶として帰属できる単一相であり、空間群は層状岩塩形のR-3mとして想定することができた。</p> <p>この結晶構造モデルを仮定して、得られた回折データについて結晶構造解析をおこなったところ、Co,Ni,Mnが3aサイトにランダムに配置した構造であり、3bサイトのLiとの間で3%ほどのカチオンミキシングを生じているモデルにおいて、もっとも高い信頼値を得ることができた。</p> <p>以上より、今回の測定において、X線回折では判断が難しい原子番号の近い元素(Co,Ni,Mn)の分布の様子、また原子散乱因子の小さな元素(Li,O)においてもその原子位置を特定でき、それぞれの結晶パラメータを精密化することが可能であった。</p>

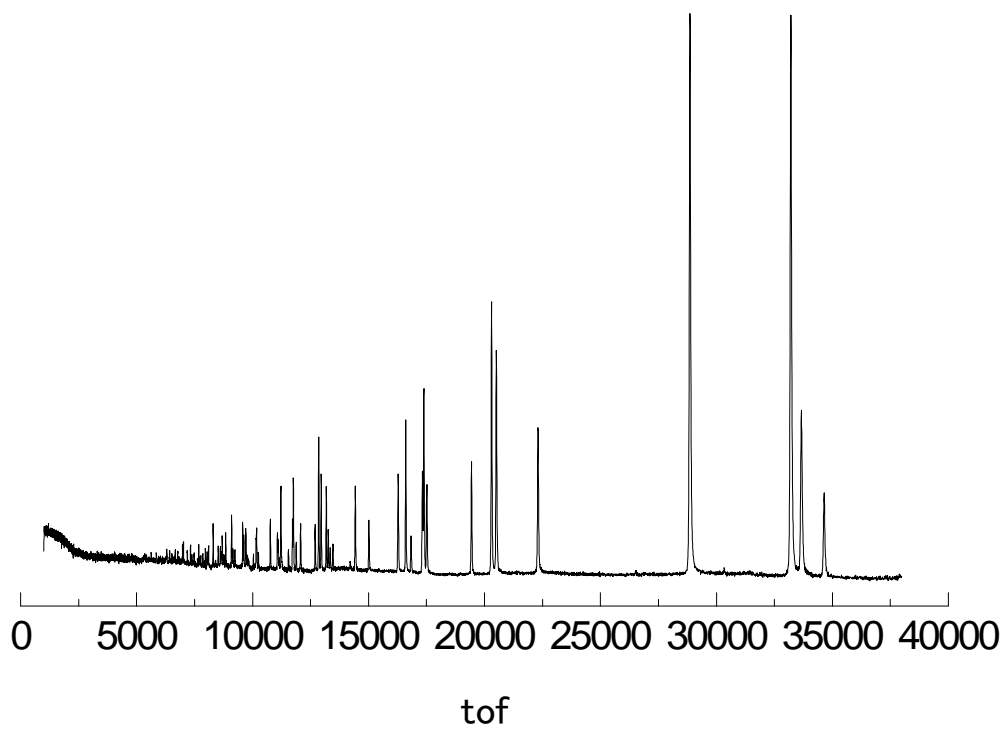


図 $\text{LiCo}_{1/3}\text{Ni}_{1/3}\text{Mn}_{1/3}\text{O}_2$ の回折データ