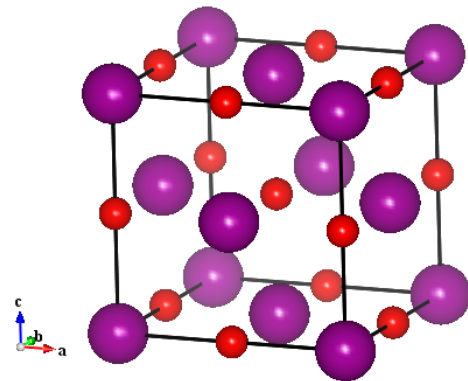


## 演習課題 M05 : 結晶構造と物質の性質

私たちが普段目にしてる「物」は、固い物や柔らかい物、様々な色や形、電気を通す物や通さない物、多種多様な性質があります。これら物の性質（物性）はどのようにして決められているのでしょうか？この演習では、物質の結晶構造を通して物質を眺め、その物性とのつながりを考えてみるのがテーマです。

### 1) 酸化マンガン $MnO$ の磁気相転移が誘起する構造相転移

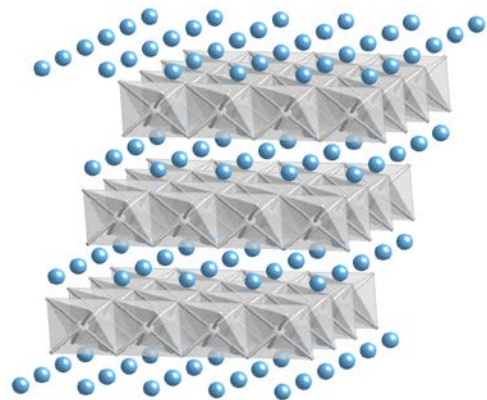
$MnO$  は室温で立方晶構造をとる酸化物です。この物質は、世界で初めて反強磁性秩序の存在を証明した物質として有名ですが、中性子回折実験によって転移点以下での磁氣的超格子反射を観測したことによって確認されました。Shull らはこの仕事によって、ノーベル賞を受賞しています。本演習では X 線回折を用いて転移点 ( $T=120^{\circ}K$ ) 近傍での結晶構造を測定し、温度変化による回折プロファイルの違いから結晶構造の変化を観測します。結晶構造とは何か、どのように変化をするのかを学びます。X 線の測定を行うことで、どのような 3 次元原子配列が実現しているのか謎解きをします。同時に磁化率の温度依存性を測定し、磁性の変化を観測します。物質の磁性とは何か、磁化率とは何かを学びます。併せて磁性と構造との相関を考えます。秋に予定している中性子を使った実習では、実際に「磁気」構造を観測できます。夏の実習と併せて、結晶構造（原子配列）-磁気構造（スピン配列）-磁性を包括的に学んでいきましょう。



$MnO$  の結晶構造（空間群： $Fm-3M$ ）。赤が O（酸素）、紫が Mn（マンガン）原子を表す。

### 2) リチウムイオン二次電池技術を支える電池材料の構造と物性

バッテリーといえばスマートフォン、携帯電話、ラップトップコンピュータと様々な小型デバイスに電力源として搭載され利用されており、現在の生活には不可欠のものとなっています。バッテリーの歴史は、高容量、高出力化そして軽量化へ突き進み、ニッカド、ニッケル水素、そしてリチウムイオン電池へと変化してきました。本実習では、リチウム二次電池正極材料として初めて市販化された  $LiMO_2$  ( $M = Co$ ) という材料を用いて実習を行います。この材料は、岩塩型層状化合物と呼ばれる構造をしています。図中青丸が Li イオンで、八面体が  $MO_2$  を表しています。Li イオン層と  $MO_2$  層が交互に積層するのが大きな特徴で、この構造を見てわかるように Li イオンが二次元的に拡散できそうな構造であることがわかります。充電現象により Li イオンがこの構造から脱離しますが、その時どのような構造変化があるのでしょうか？ X 線回折測定と電気化学測定から Li イオンの含有量と構造の関係を探ります。



$LiMO_2$  の結晶構造。青が Li イオン八面体（灰色）が  $MO_2$  を表す。