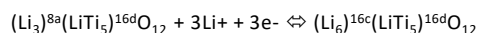


チタン酸リチウム負極のLi吸蔵状態解析： 高分解能Li固体NMRスペクトルを得るには？

関連製品：核磁気共鳴(NMR)

スピネル型チタン酸リチウム(LTO)を負極材として用いたリチウムイオン二次電池は、その安定な構造から、安全性、サイクル特性に優れ、すでに実用化されております。LTOでの反応は以下の式で表すことができます。

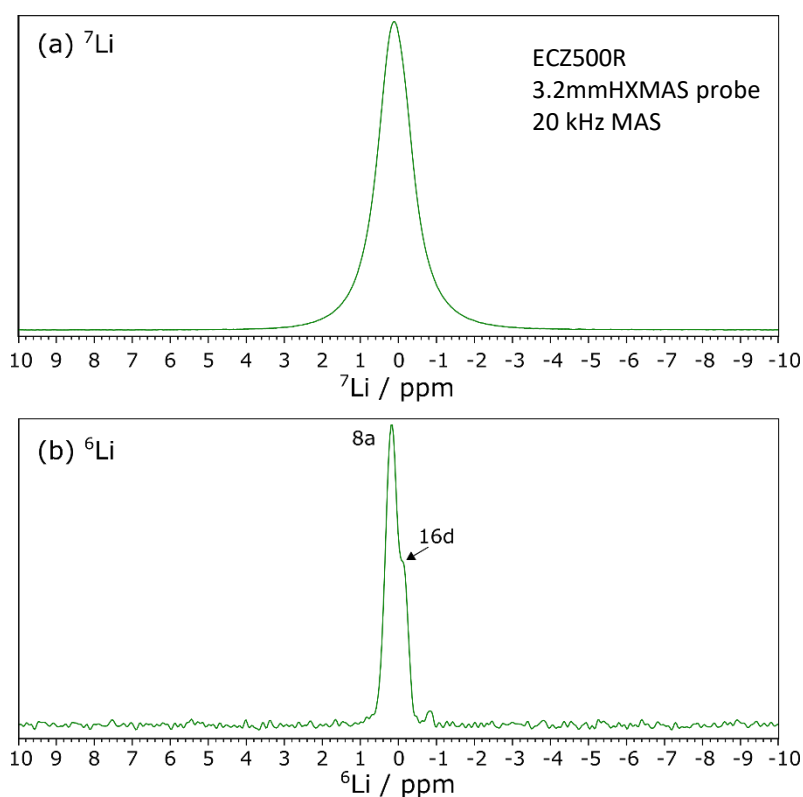


Liの吸蔵状態を解析するには、8a、16d、16cの3サイトを区別することが望まれますが、特に8aと16dサイトの化学シフト差は非常に小さく、感度が良く一般的に用いられる⁷Li固体NMRスペクトルでは、線幅が広く一本の信号しか確認できません。(Fig.1a)

⁶Li MAS NMR

NMRで観測できるLi原子には⁶Liもあります。⁷Liに比べ感度は低く1/30程度しかありませんが、四極子相互作用が小さく、また同種核間の双極子相互作用も小さいため、⁷Liに比べ細い線幅のスペクトルが得られます。Fig.1bに示すように、⁶Li固体NMRスペクトルでは8a、16dを区別して観測することができます。測定に時間はかかりますが、3.2mm径などの一般的な固体NMR試料管で~20kHz程度の回転周波数でスペクトルを取得できます。

	⁶ Li	⁷ Li
Natural abundance / %	7	93
Spin	1	3/2
Magnetic ratio / rad s ⁻¹ T ⁻¹	3.94 x 10 ⁷	10.4 x 10 ⁷
Quadrupole moment	-8 x 10 ⁻⁴	-4 x 10 ⁻²



試料は産業技術総合研究所 橋田晃宜博士にご提供いただきました。

本資料のスペクトルの一部は、以下論文に使用されています。

M. Kitta, T. Kojima, R. Kataoka, K. Yazawa, and K. Tada *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2020, 12, 8, 9322-9331

Copyright © 2020 JEOL Ltd.

このカタログに掲載した商品は、外国為替及び外国貿易法の安全輸出入管理の規制品に該当する場合がありますので、輸出するとき、または日本国外に持ち出すときは当社までお問い合わせ下さい。

