

固体高分子形燃料電池の白金代替触媒として有望な Ta₂O₅系・カーボン複合体触媒の活性点構造を解明

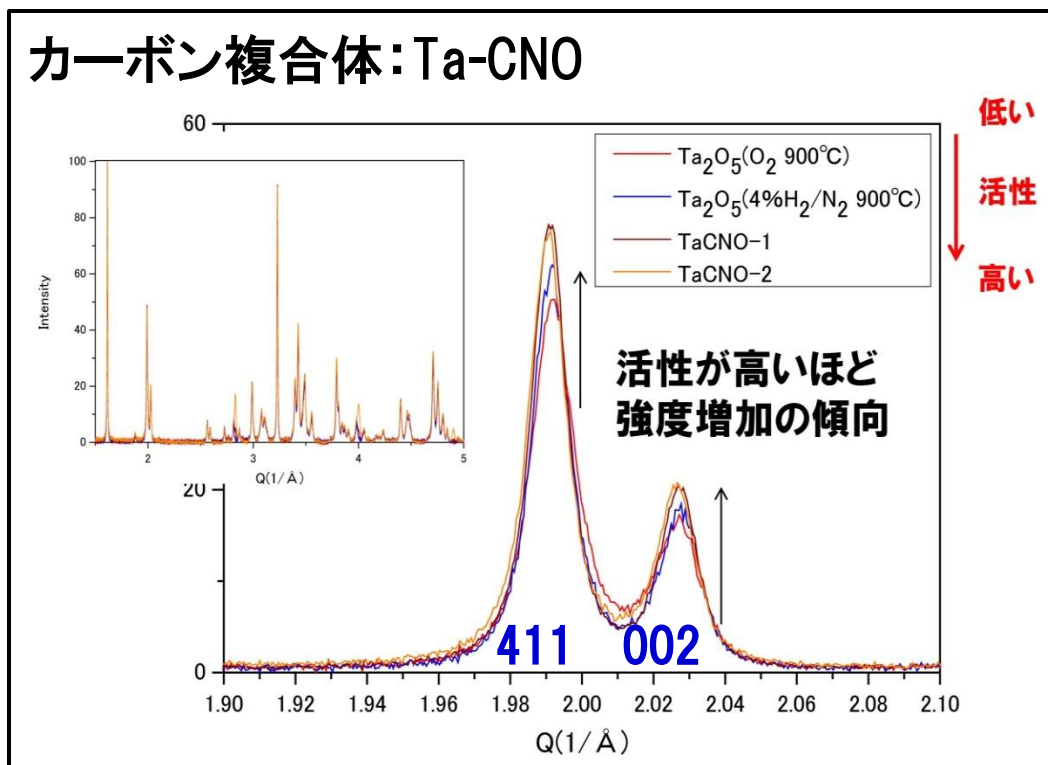
中性子回折では触媒活性が高いほど411, 002ピーク強度が増大



酸素サイトの欠損を仮定した回折シミュレーションと合致 (X線回折では検出不可)



透過電子顕微鏡観察と組合せて酸化物触媒の活性点構造を解明



Ta₂O₅とTaO-CNO触媒の中性子回折パターン

Li過剰層状正極材料Li₂MnO₃の結晶構造解析

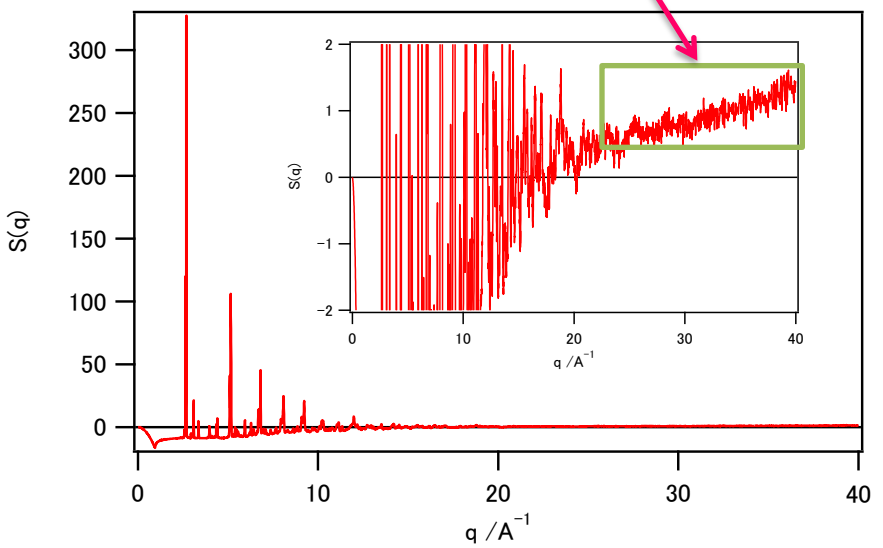
研究成果の概要 (作成例)

(株)日産アーク 久保 潤 啓

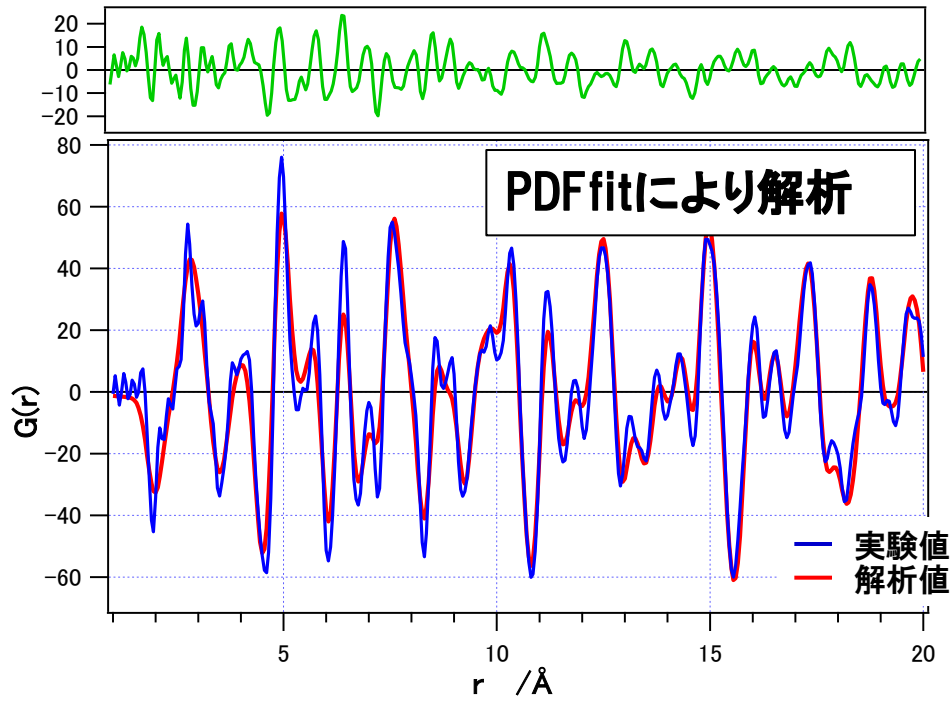
Li過剰型正極電池材料において不可逆容量や劣化を生じる積層欠陥構造の解明

X線回折では詳細な解析ができないため、広いQ範囲を測定できるTOF中性子回折によるPDF解析が有効

S(q)はq→∞でほぼ1だが、十分に収束していないため、補正など検討が必要



Li₂MnO₃(天然Li)のS(q) 算出結果



結晶構造	積層欠陥比率%
C _{2/m}	61
C _{2/c}	21
P ₃₁₁₂	18

積層欠陥の割合を解析可能