

„Struktury krystaliczne $\text{Li}_{1-x}\text{Mn}_{2+x}\text{O}_4$ ”

P. Piszora^a, W. Nowicki^a, J. Darul^a, A. D. Evans^b

(a) Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Polska

(b) European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, Francja

Tlenki litowo-manganowe spotykają się z dużym zainteresowaniem ze względu na możliwość stosowania ich w technologiach odwracalnych ogniw litowo-jonowych. Interesujące właściwości strukturalne i elektrochemiczne tlenków $\text{Li}_{1-x}\text{Mn}_{2+x}\text{O}_4$ wskazują na możliwość stworzenia w oparciu o nie nowego rodzaju materiałów hybrydowych.

W ramach projektu badawczego wykonano szereg synchrotronowych pomiarów dyfrakcyjnych polikrystalicznych tlenków litowo-manganowych przy użyciu linii eksperymentalnej ID 31. Użyto promieniowania o długości fali 0.41274 Å. Dla próbek umieszczonych w kapilarze wykonywano pomiary dyfrakcyjne w szeregu temperatur z zakresu od 100 K do 500 K.

Przy opracowywaniu wyników doświadczalnych z wykorzystaniem metody Rietvelda użyto programu GSAS. W rezultacie uzyskano szczegółowe informacje o zmianach stopnia odkształcenia tetragonalnej odmiany polimorficznej tlenku litowo-manganowego wraz z temperaturą. Wykazano wpływ dystrybucji i stopnia utlenienia manganu na odwracalność strukturalnej przemiany fazowej. Ponadto udowodniono, że podstawienia 2,5% manganu w spinelowej podsięci kationowej jonami żelaza powoduje przesunięcie temperatury przemiany. Odkształcenie sieci spinelowej ma miejsce jedynie gdy wykazujące efekt Jahn-Tellera jony Mn^{3+} zajmują więcej niż połowę pozycji oktaedrycznych. Jak wykazano, utlenienie jonów Mn^{3+} w temperaturach powyżej 450 K powoduje nieodwracalność przemiany strukturalnej. Określenie w wyniku analizy Rietvelda współrzędnych atomów pozwoliło na wyznaczenie kierunku orientacji tetragonalnie odkształconych oktaedrów oraz na stwierdzenie zmiany ich uporządkowania wraz z temperaturą.

Wyniki przygotowywane są do publikacji:

P. Piszora, J. Darul, W. Nowicki, A. D. Evans, J. Solid State Chem.