

電池材料のラマンスペクトルの計算  
Simulation of Raman spectrum of battery materials

京都大学 産官学連携本部 山中俊朗

研究成果概要

我々は金属フッ化物の脱フッ化とフッ化を用いる高容量の革新的 2 次電池である、フッ化物シャトル電池の開発を進めている。 $\text{BiF}_3$  はこの電池の活物質として最もよく研究されている材料である。実験では、 $\text{BiF}_3$  電極の電位を下げていくときの脱フッ化の開始電位が、斜方晶  $\text{BiF}_3$  の場合より立方晶  $\text{BiF}_3$  の場合のほうが約 0.3V 程度低いという結果を得た。そこで本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムの CASTEP を利用し、斜方晶の  $\text{BiF}_3$  と立方晶の  $\text{BiF}_3$  のエネルギーを計算した。斜方晶の Final energy は  $-10591.09712227$  eV、立方晶の Final energy は  $-10587.10028745$  eV であった。どちらも単位格子に 12 個のフッ素を含んでいる。これより F ひとつの引き抜きに対して斜晶のほうが 0.3V 程度安定であり、脱フッ化の電位は 0.3V 程度低いと推測される。これは実験結果から期待される結果とは逆であり、立方晶の低い脱フッ化電位の原因は他にあることがわかった。さらに他の物理量を計算し、比較検討する予定である。