

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、フッ化物シヤトル電池の開発を進めている。BiF<sub>3</sub>、CuF<sub>2</sub>、PbF<sub>2</sub>はこの電池の正極用活物質としてよく研究され、AlF<sub>3</sub>は負極用活物質として研究されている。実験で活物質の電位を下げていくと、金属になる前の部分脱フッ化の時点でかなり電子状態が変化することがわかった。

そこで、今年度は斜方晶のBiF<sub>3</sub>と立方晶のBiF<sub>3</sub>、斜方晶のPbF<sub>2</sub>と立方晶のPbF<sub>2</sub>、AlF<sub>3</sub>などが部分脱フッ化したときに、電子状態がどのように変化するかをCASTEPで計算した。AlF<sub>3</sub>の完全結晶の電子状態密度を図1に示す。7.1eVという大きなエネルギーギャップが見られる。フッ素欠損を入れたときの電子状態密度を図2に示す。価電子帯と伝導帯の間に欠陥準位が現れ、その結果、エネルギーギャップは1.6eVになり、半導体のレベルにまで小さくなった。

この現象は、NaClなどのアルカリハライドにおいてハロゲンの空孔ができた時にF中心ができることと似ている。もっとギャップが小さくなれば、電子伝導が良くなり、脱フッ化が促進されると考えられる。このような電子状態の変化を様々な金属フッ化物について調べることで、活物質の設計における指針を得ることができると考えている。

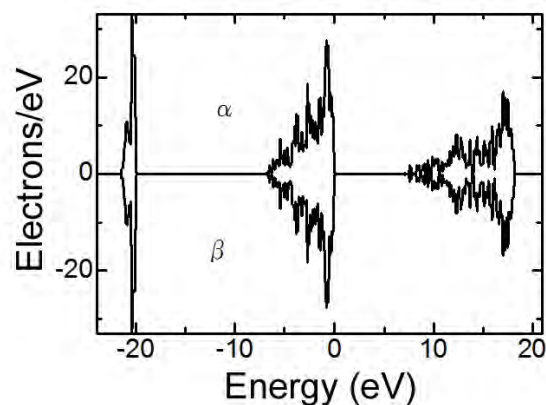


図1 AlF<sub>3</sub>の電子状態密度

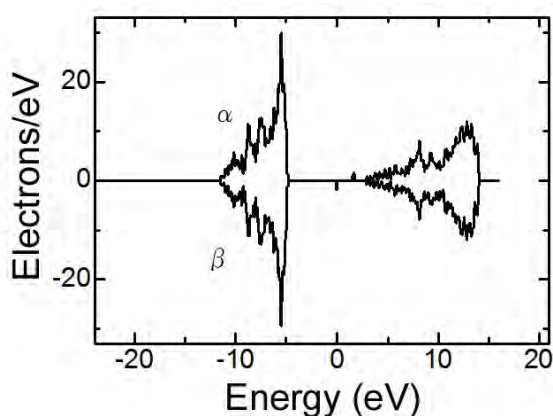


図2 フッ素欠損があるAlF<sub>3</sub>の電子状態密度

発表論文(謝辞あり) なし。

発表論文(謝辞なし) なし