

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

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、 LaF_3 のラマンスペクトル中のピークについて、対応する振動モードの原子の動きを調べた。

計算結果(図 b,c)が実験結果(図 a)を非常によく再現している。ピーク A に対応する原子の動きを図 d に示す。このモードでは主に層間のフッ素(F1)が層に垂直方向((001)方向)に振動することがわかった。ピーク B に対応する原子の動きを図 e に示す。このモードでは主に層内のフッ素(F2、F3)が層に並行方向に振動することがわかった。 LaF_3 の(001)面からフッ素を電気化学的に脱離させるとピーク A の強度が減少した。計算結果から、(001)方向に振動する F1 が(001)面から脱離したことがわかった。

100cm^{-1} 以下の遅い振動は La の振動であることもわかった。

発表論文(謝辞あり) Toshiro Yamanaka, Hirofumi Nakamoto, Takeshi Abe, Koji Nishio, Zempachi Ogumi, “Formation and Propagation of Fluorine-Deficient Phases in Large LaF_3 Single Crystals during Electrochemical Defluorination”, ACS Applied Energy Materials (2019) in press

発表論文(謝辞なし) なし

