

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。 BiF_3 はこの電池の活物質としてよく研究されているが、実験で 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 BiF_3 の場合より立方晶 BiF_3 の場合のほうが約0.3V程度低く、昨年度はCASTEPを利用し、斜方晶の BiF_3 と立方晶の BiF_3 のエネルギーを計算した。しかし斜方晶のFinal energyは立方晶のFinal energyよりがF1つの引き抜きに対し0.3V程度安定であり、斜方晶の脱フッ化の電位のほうが0.3V程度低いと推測され、実験を説明できていない。

今年度は斜方晶の BiF_3 と立方晶の BiF_3 のフォノンの自由エネルギーをCASTEPで計算した。ここでも斜方晶のほうがエネルギーが低かった。さらに電子密度を計算したところ、斜方晶のほうがバンドギャップが大きく、電気伝導が低いと予想され、斜方晶のほうが脱フッ化しにくいと予想され、実験を説明できなかった。今後さらに検討を続けていく。

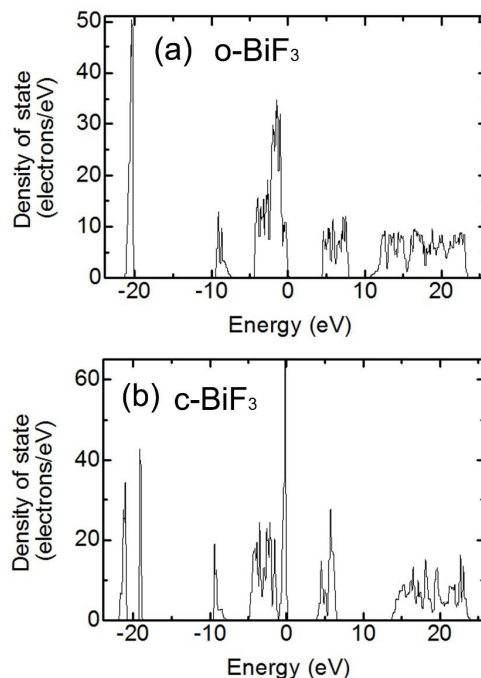
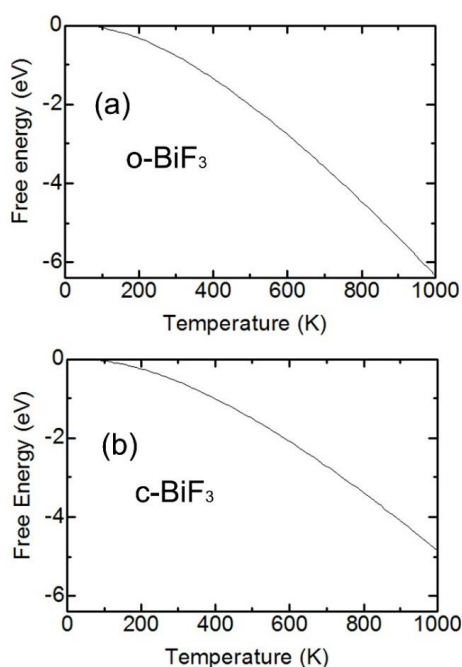


図1 (a)斜方晶と(b)立方晶の BiF_3 のフォノンの自由エネルギー 図2 電子状態密度
発表論文(謝辞あり) なし。
発表論文(謝辞なし) なし