

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、いくつかの電池材料のラマンスペクトルの計算を試みた。

FePO_4 は電子状態がメタリックになり、計算ができなかった。

LaF_3 では図に示すように計算結果が実験結果を非常によく再現した。

それぞれのピークを層内のフッ素の振動、層間のフッ素の振動、ランタンの振動などに同定することができた。この解析により、脱フッ化過程では層間のフッ素が脱離することが推測された。

