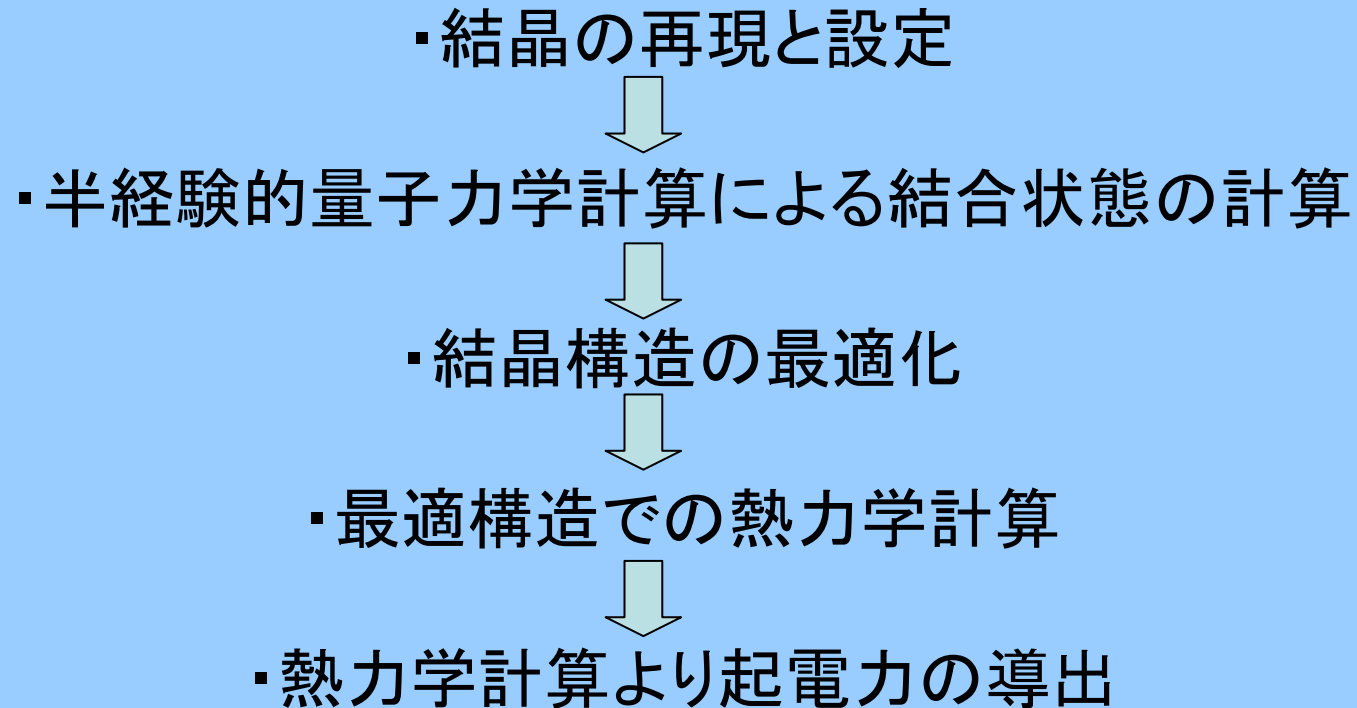


$\text{Li}_x\text{M}_2(\text{PO}_4)_3$ 電池材料計算

Li電池の起電力評価を目的に半経験的量子力学計算をエネルギー計算へ適用。

検討項目及びフロー ;



$\text{Li}_x\text{M}_2(\text{PO}_4)_3$ 電池材料計算(結晶構造最適化)

・結晶の再現と設定

結晶データ・・・結晶群、格子定数、原子位置座標、

§ 1 相変化(α 、 β 、 γ -相) 及び 転移温度

§ 1 A.B.Bykov らによる

・Superionic Conductors $\text{Li}_3\text{M}_2(\text{PO}_4)_3$ ($\text{M}=\text{Fe}, \text{Sc}, \text{Cr}$):

Synthesis, structure and electrophysical properties

(Solid State Ionics 38 1990 p31-52)

・半経験的量子力学計算による結合状態の計算

各相毎に 半経験的量子力学計算 より トータルエネルギー(電子エネルギー 反発エネルギー)、生成熱 を算出

・結晶構造の最適化

半経験的量子力学計算よりもとめた トータルエネルギー、生成熱 より 熱力学的考察 を行い 最適化した結晶構造 を決定

$\text{Li}_x\text{M}_2(\text{PO}_4)_3$ 電池材料計算 (熱力学計算、 起電力計算)

・最適構造での熱力学計算 及び 起電力の導出

最適構造で 算出された 熱力学量 を用い

Li含有量の x_1 から x_2 への変化に伴う エネルギー差 から 起電力 を

$$\Delta G / \{ (x_1 - x_2) \cdot z \cdot F \} \text{ より求める (OK 近似) } \quad \text{\S 2}$$

ΔG は ギブス自由エネルギー、 z は荷電子数、 F はファラデー定数

\S 2 M.K.Aydinol らによる

・Ab initio study of lithium intercalation in metal oxides and metal dichalcogenides

(Physical Review B 56 3 1997 p1354-1365)

・First-Principles Prediction of Insertion Potentials in Li-Mn Oxides for Secondary Li Batteries

(Journal of Electrochemical Soc. 144 11 1997 p3832-3835)