

# 減衰全反射遠紫外 (ATR-FUV) 分光法と量子化学計算を用いた電極界面イオン液体の電子状態解析

大阪大学 基礎工学研究科 氏名 今井 雅也

**目的** 減衰全反射遠紫外 (ATR-FUV) 分光法を用いた金属イオンを含むイオン液体電解液の電子状態分析によって、金属イオンの種類 ( $\text{Li}^+$ ,  $\text{Ag}^+$ ) ごとにスペクトルシフトの挙動が異なった。そのメカニズムを解明するため、Gaussian16で励起状態計算 (TD-DFT法) を行った。

**内容** 金属イオン ( $\text{Li}^+$ ,  $\text{Ag}^+$ ) と溶媒和したイオン液体 (Dicyanamide :  $\text{N}(\text{CN})_2^-$ ) の最安定構造を算出し、励起状態計算を行った。

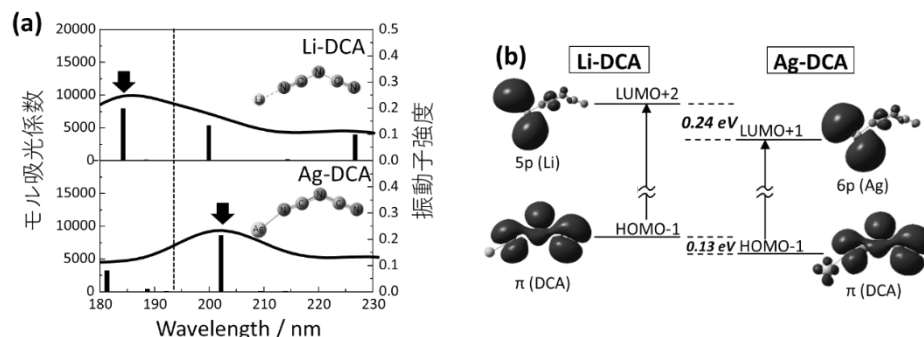
**結果** ATRスペクトルで確認されたシフトを支持する結果が理論計算からも得られた。またLi-DCA, Ag-DCAの励起状態の軌道エネルギーが異なることが、スペクトルシフトの原因だと判明した。

利用した計算機

ノード時間  
使用メモリ  
ベクトル化率  
並列化

OCTOPUS

約1000  
180GB  
—  
—



図(a) 励起状態計算から得られたスペクトル. (b)エネルギー準位図.