

量子化学計算と分子動力学計算による 界面イオン液体挙動のシミュレーション

大阪大学大学院基礎工学研究科

田邊一郎、松本良明、樽井章太、柿木智紀、花森祐一郎

目的 電気化学において特に重要な電極/イオン液体界面のシミュレーション

内容 (1) 量子化学計算による電子状態計算

内容 (2) 分子動力学計算による電子状態計算

結果 (1) イオン液体の吸収スペクトル (実験結果) の帰属に成功した

結果 (2) 電極電位に応じたイオン液体の密度や配向を明らかにした

利用した計算機
ノード時間

OCTOPUS
1500時間

