

量子化学計算と分子動力学計算による電極界面イオン液体の挙動解析

大阪大学 大学院基礎工学研究科 福井 賢一

目的 電気化学デバイスにおけるイオン液体と電極の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解析
(2) 分子動力学計算による電位に依存した界面電気二重層構造の解析

結果 (1) 金属イオンを含むイオン液体電解液の吸収スペクトル (実験結果) の帰属ができた
(2) 電極電位に応じて金属イオンを含むイオン液体電解液の電極近傍での振る舞いを解析できた

利用した計算機 OCTOPUS
ノード時間 4900 時間
使用メモリ 1860 GiB
使用ソフトウェア Gromacs 等

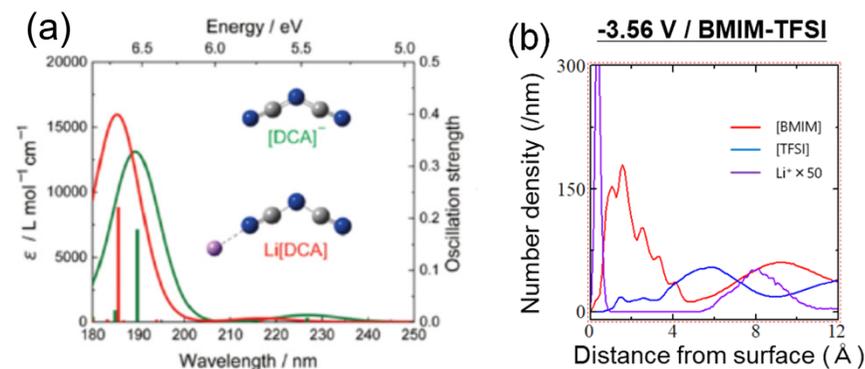


図 (a) Liイオンへの配位による吸収スペクトルの変化の帰属,
(b) 負電位におけるGraphite電極近傍の各イオンの密度分布.