

ATR-FUV分光法と分子シミュレーションを用いたイオン液体電解液が電極界面で形成する特異な分子構造の解明

大阪大学 大学院基礎工学研究科 今井 雅也

目的 高効率かつ安全なリチウムイオン電池用の電解液としての応用が期待されているイオン液体を対象とし、その電極界面でのナノスケールの描像獲得を目指す。

内容 量子化学計算(Gaussian)を用い減衰全反射遠紫外分光法で得られた吸収スペクトルを帰属した。またMD計算を用い、電極界面で最安定なイオン液体モデルを評価した。

結果 吸収スペクトルは印加電位に応答することが確認された。またこの応答が界面イオン液体の配向変化に起因すること帰属された。

利用した計算機	OCTOPUS
ノード時間	240
使用メモリ	180GB
ベクトル化率	85%
並列化	16並列

