

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電解液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解液の電子状態解析

(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) Li^+ イオンを含むイオン液体電解液について, cation-anion間の相対配置と相互作用が吸収スペクトル (実験結果) に与える影響の評価ができた

(2) 電極電位に応じて Li^+ 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とアニオンに配位された Li^+ イオンが正電荷をもつ電極にいかにか接近するか解析できた

利用した計算機

SQUID

使用ソフトウェア

Gaussian 16,
Gromacs 等

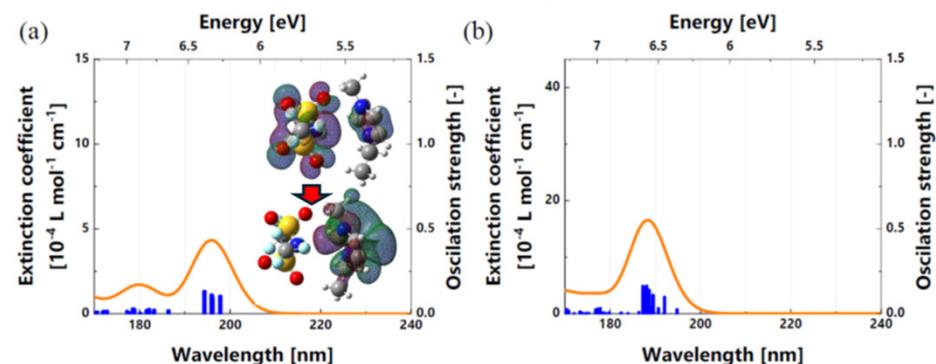


Fig. Extinction coefficient calculated for the groups (a) with certain cation-anion interaction, and (b) without it.