

電解液中の電子的溶媒和構造研究

立教大学 理学部 氏名 田邊一郎

目的 リチウムイオン電池の電解液中の溶媒和構造の解明

内容 リチウムイオン電解液のスペクトルを量子化学計算と分子動力学計算から解釈する

結果 有機溶媒（DMC）へのリチウムイオン添加に伴うスペクトル変化をTD-DFT計算から再現し、その電子状態を明らかにした。

利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群
ノード時間 2,000 時間

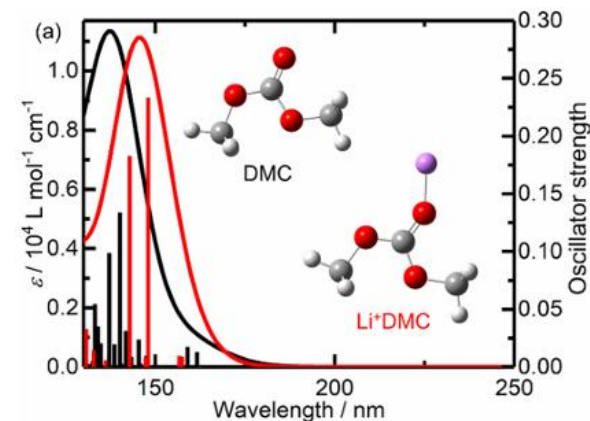


図: 溶媒(DMC)と溶媒和DMCの
吸収スペクトルのTD-DFT計算結果