

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) Li^+ イオンを含むイオン液体電解液中で、複数のアニオンに配位されて電荷総和では負となる Li^+ イオンもある程度の負電荷をもつ電極に接近する振る舞いが確認され、実験事実を解釈することができた

利用した計算機 SQUID

使用ソフトウェア Gaussian 16,
GROMACS

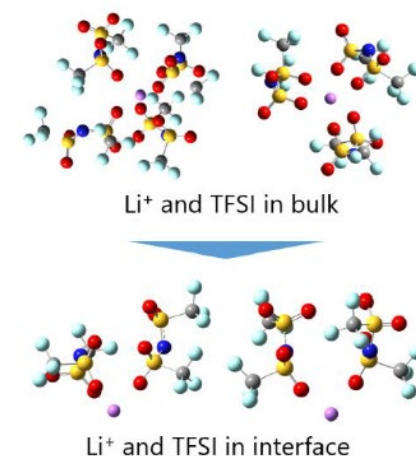


Fig. Suggested change in coordination structure around Li^+ from bulk to the negatively charged electrode interface by MD calculations.