

EX18706 (大阪大学サイバーメディアセンター推薦課題)

石井 良樹 (大阪大学大学院基礎工学研究科)

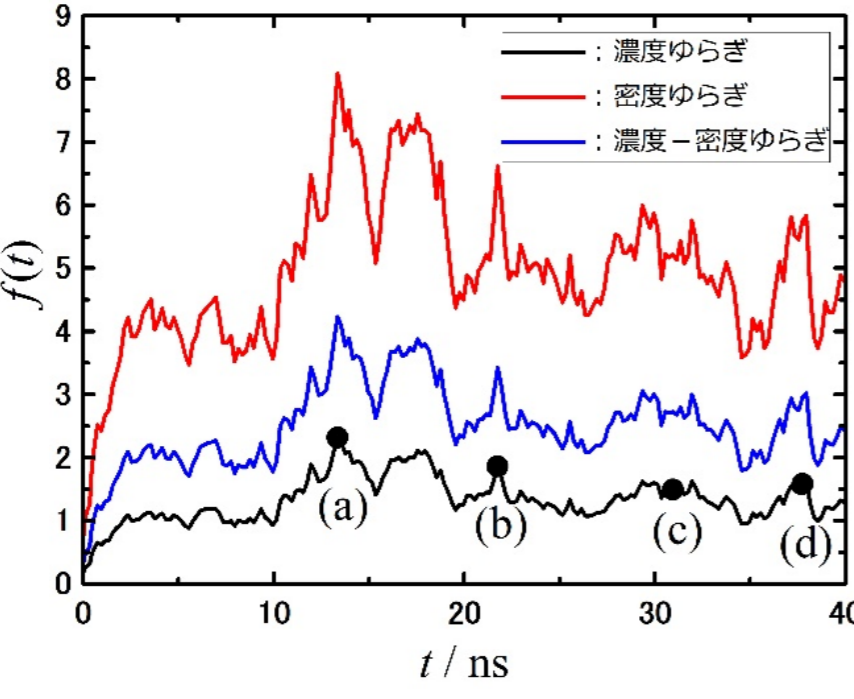
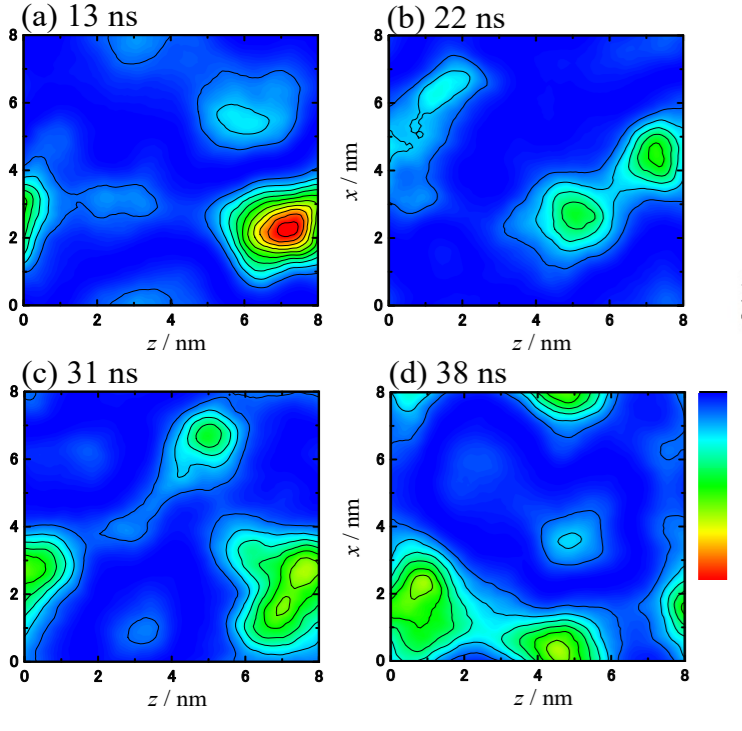
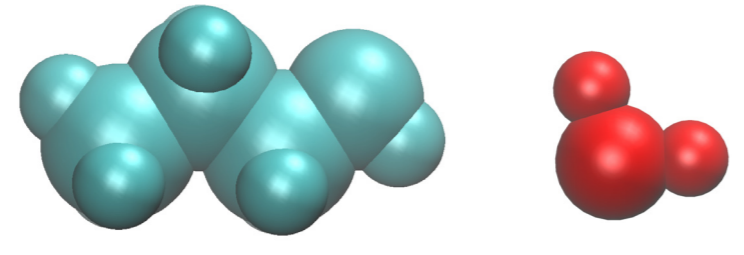
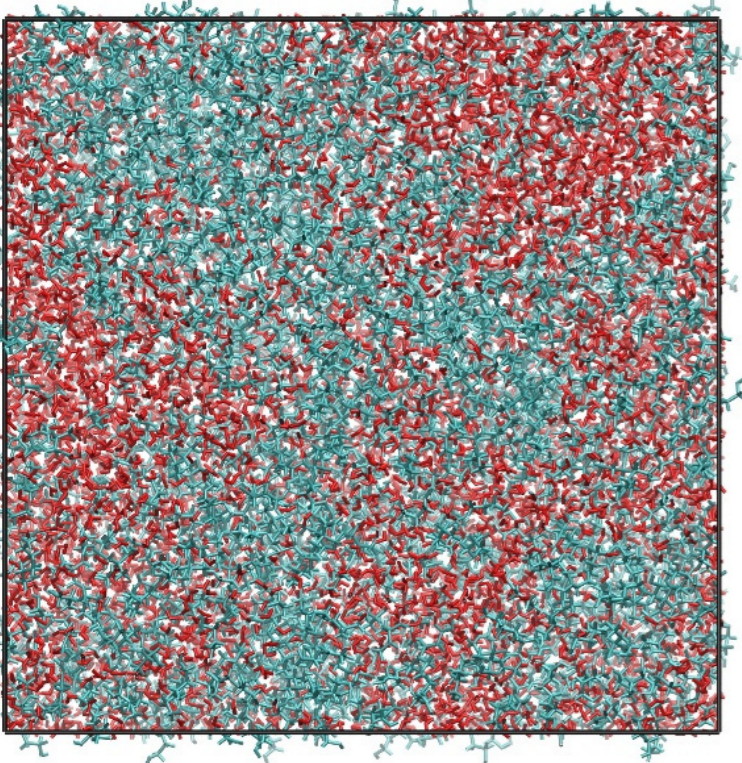
# イオン液体の輸送物性における構造不均一性の役割の分子論的解明



## 1. イントロダクション：溶液中における構造不均一性の形成と拡散

### 1.1 アルコール水溶液の構造不均一性

system:  
1-propanol aqueous solution  
molecules: 2200 : 8876  
model: OPLS-AA, SPC/E  
MD package: Gromacs 4.5.5  
reference:  
M. Ogawa, Y. Ishii, and N. Ohtori,  
Chem. Lett. 45, 98 (2016).

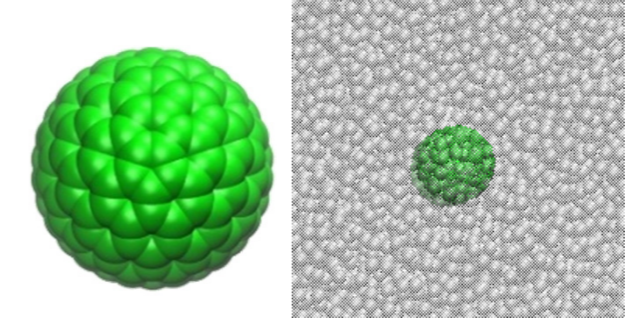


ここ数十年、イオン液体の優れた電解質特性、ガス吸収特性が注目されており、その材料設計の指針を得るため、輸送物性の実験測定が進められてきた。しかし、ナノスケールの不均一構造の発見は、分子の不均一な拡散挙動を誘起するものであり、巨視的な輸送係数と関連付けることが難しい。

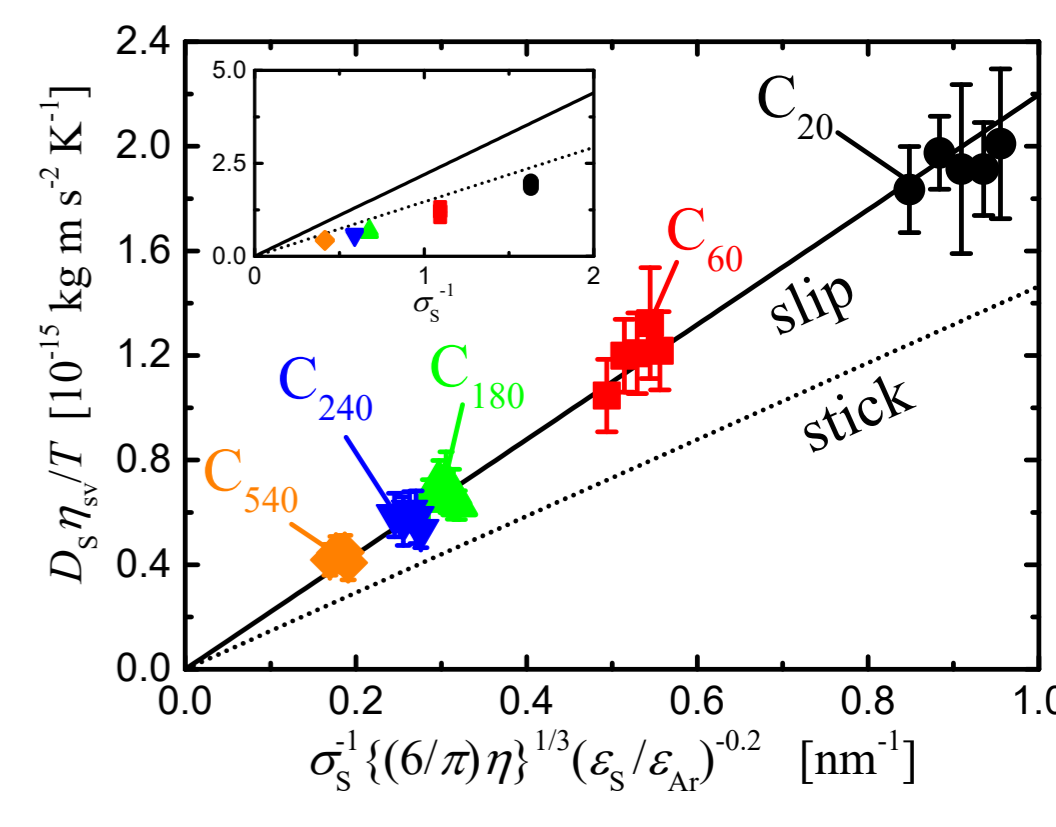
一方で申請者らは、分子動力学 (MD) 計算を用いた研究から、混合溶液の過渡的な凝集体の形成を定量的に追うことができること、また液体系の輸送係数は分子間の相互作用の強さに依存し、その挙動は溶質のサイズが数ナノメートル程度まで大きくなって変わらなことをそれぞれ明らかにしてきた。これらの結果から、溶質分子の溶媒和環境が不均一化すると、周囲から受ける相互作用が変化し、輸送物性にも影響しうると考えられる。

### 1.2 単成分溶液の分子の拡散ダイナミクス

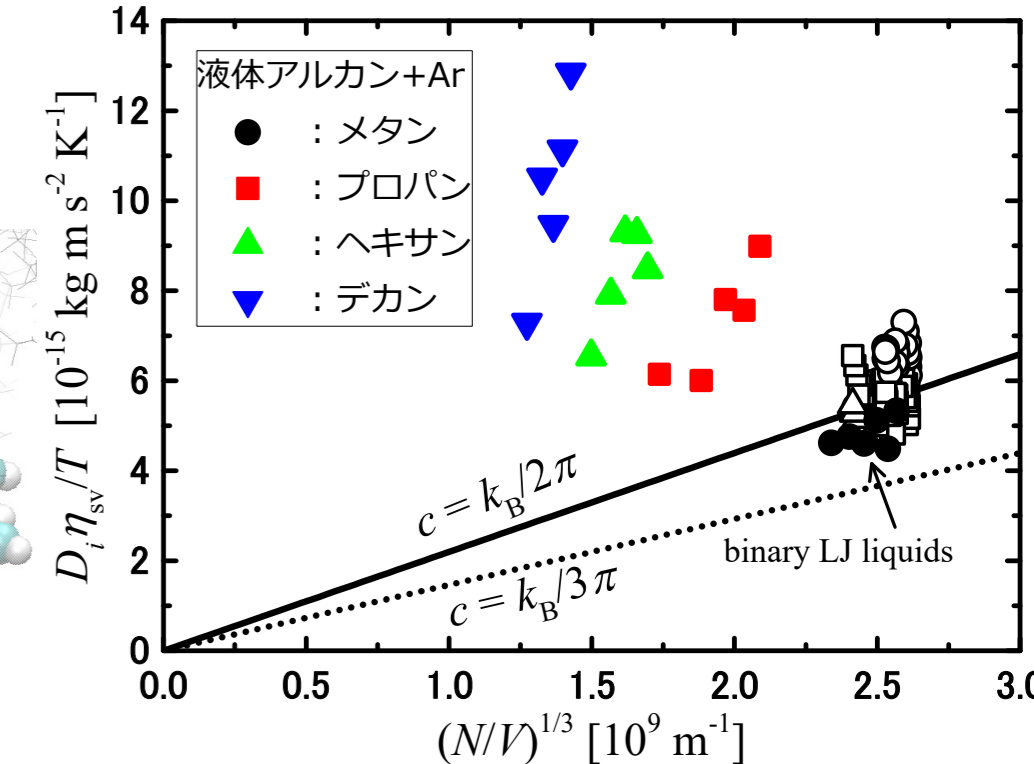
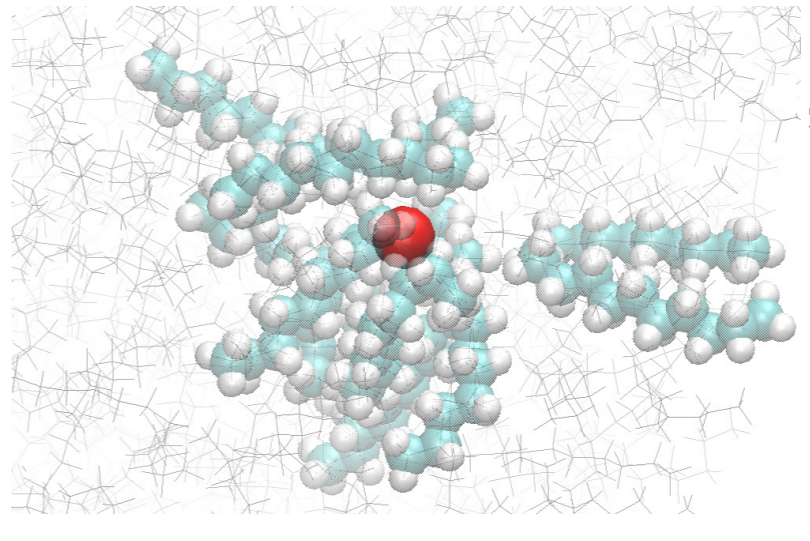
#### ① フラーレン分子の場合



system:  
fullerene nanoparticles in liquid Ar  
molecules: 8+160,000  
reference:  
Y. Ishii, and N. Ohtori,  
PRE 93, 050104 (2016).



#### ② 小分子の場合

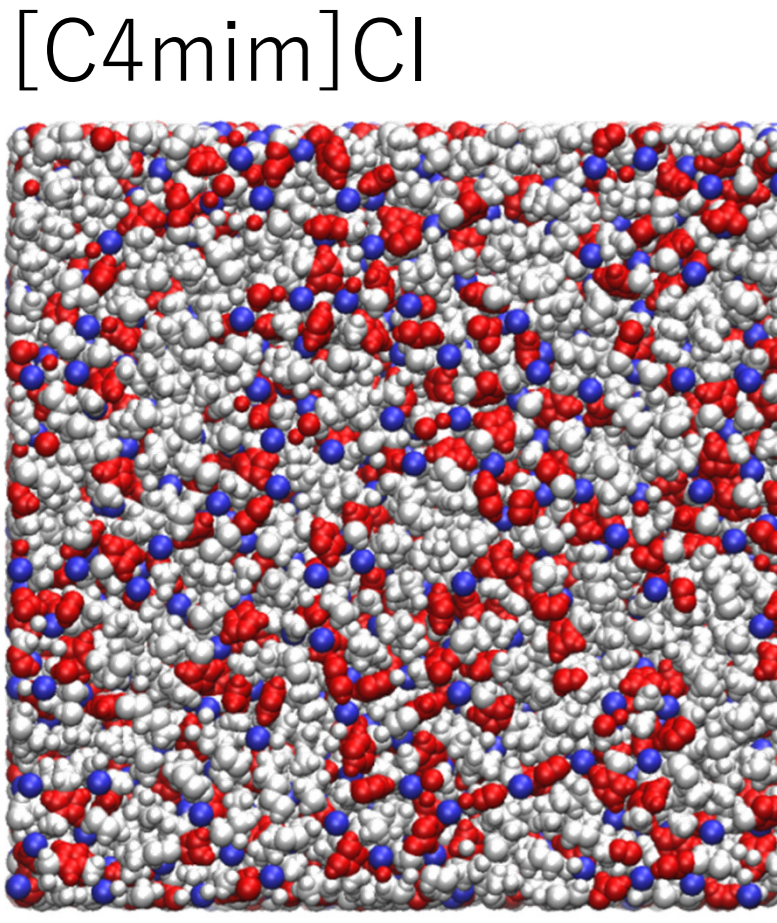


## 2. 本研究の目的：

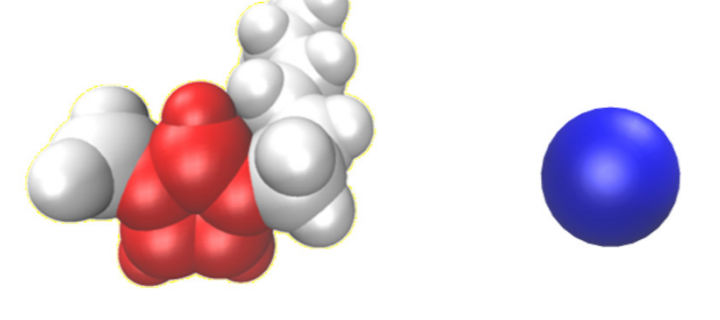
組成一定のまま温度や密度などの熱力学変数を変えると、構造不均一性はどのように変化し、輸送物性にどのように寄与するのかを調べる。特に分子動力学 (MD) 計算を用いることで、小分子が溶媒和した系に着眼し、溶媒分子と溶質分子の挙動の違いをナノ～メゾスケールの構造から調べることで、構造と溶媒和特性、輸送係数の間の関係を明らかにする。

## 3. 研究内容の紹介：

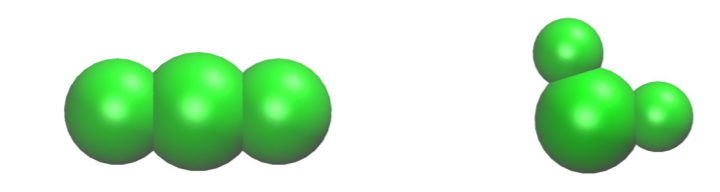
### 3.1 イオン液体の構造不均一性と溶媒分子



極性部と非極性部



①ここに中性分子が溶媒和すると、極性部と非極性部とその界面、どこに溶媒和する？

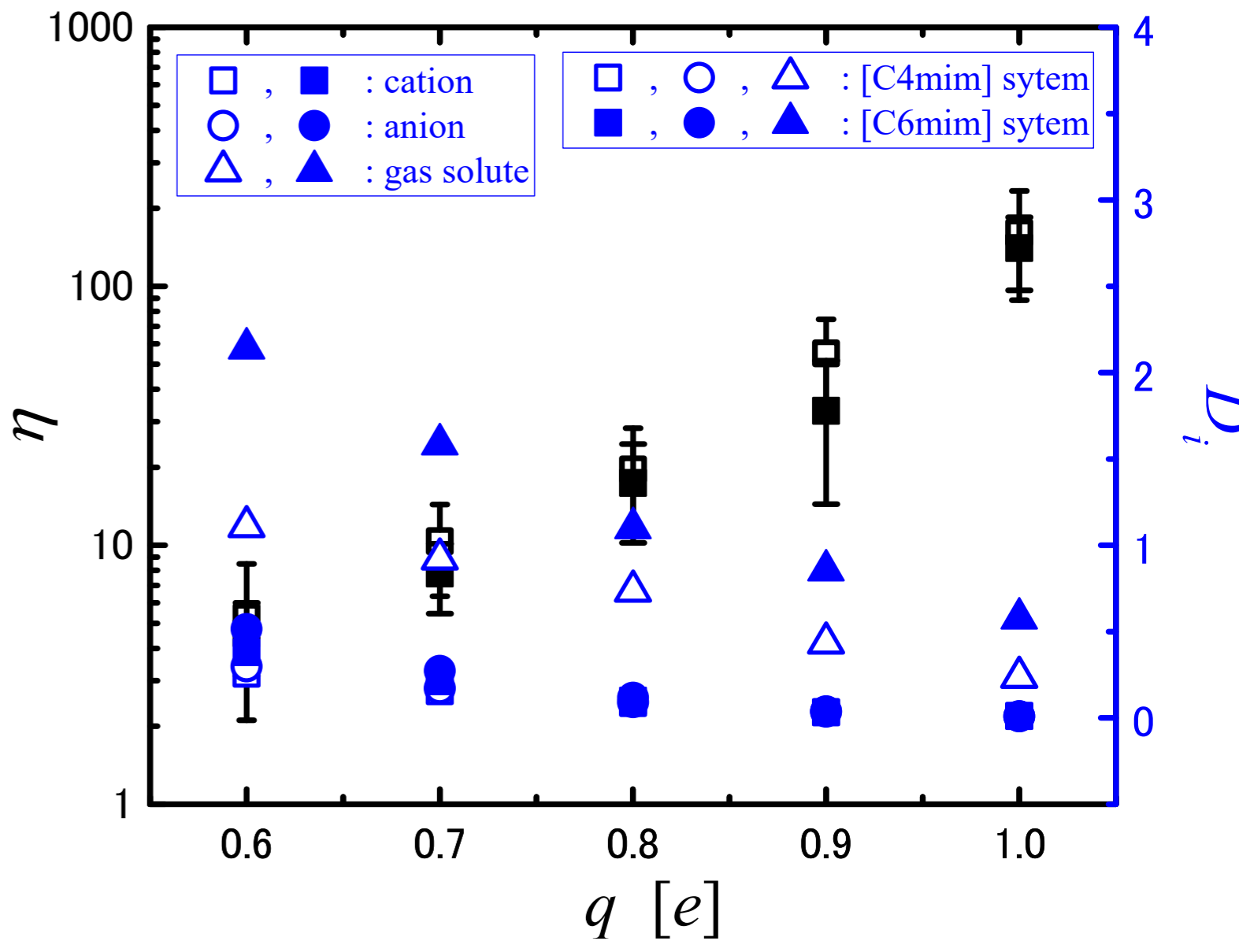


②温度や圧力、構造不均一性がどのように変わる？溶媒の輸送係数の依存性にも影響する？

③溶質となるガス分子の拡散係数は、構造や溶媒和特性で推量できる？

本日までには得られた結果については、口頭と別資料にてご説明させていただきます

### 3.2 ガス分子を吸収したイオン液体の輸送係数



## 4. 謝辞：

本研究は日本学術振興会・科学研究費助成事業 (Grant No. 17J01006) の支援を受けて実施しております。また本研究の先行研究は、東京大学情報基盤センターの平成29年度若手・女性利用者推薦制度の援助を得て、スーパーコンピュータReedbushを用いて実施させていただきました (平成29年度 萌芽採択課題『密度汎関数法を用いた凝縮系の電荷分布とその溶媒和構造依存性の解明』課題番号:EX17328)。この場を借りて御礼申し上げます。