

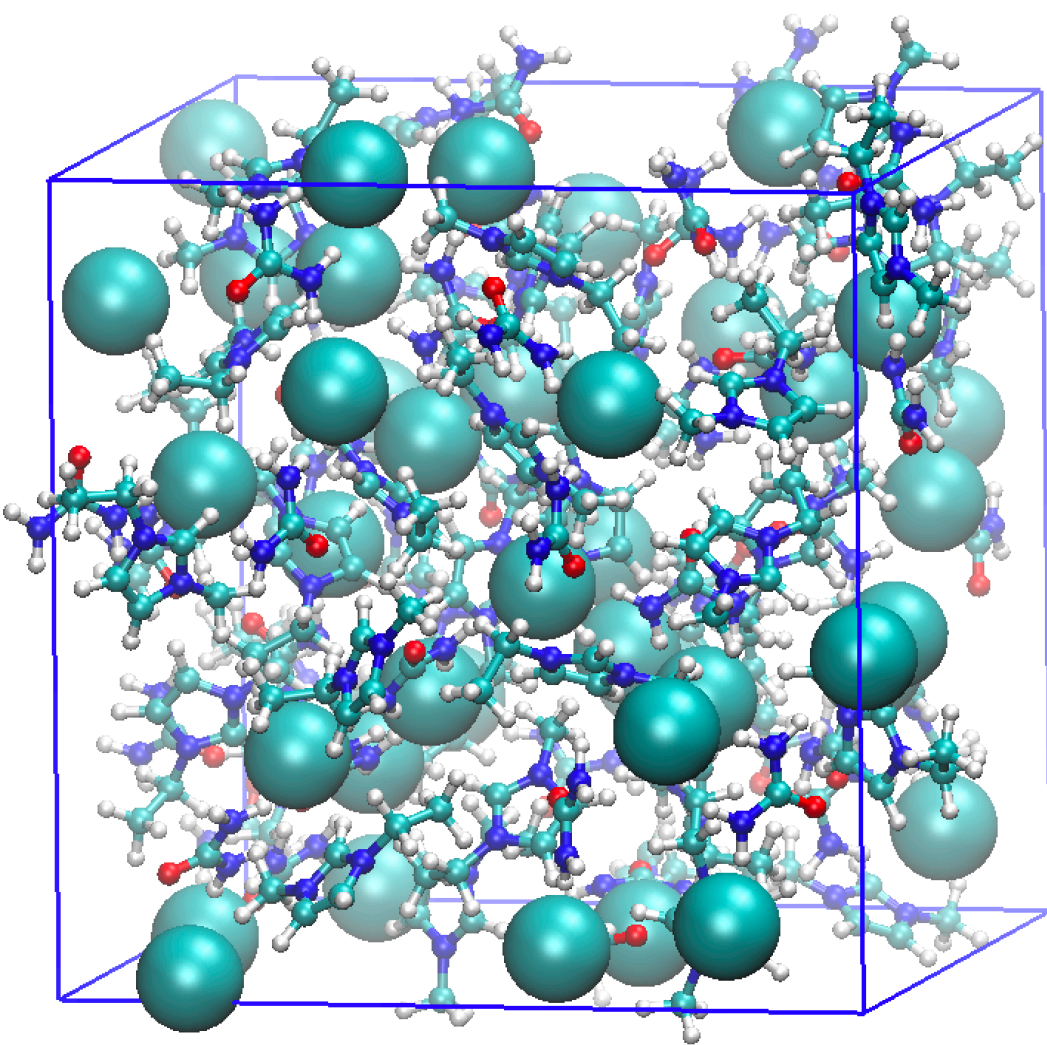
石井 良樹 (兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科)

自己組織化イオン結晶におけるナノ相分離様態と分子輸送特性のインタープレイ



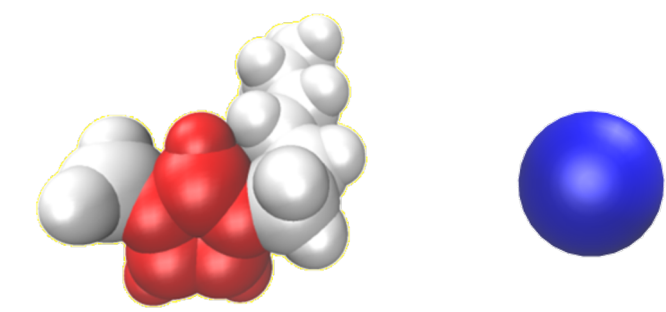
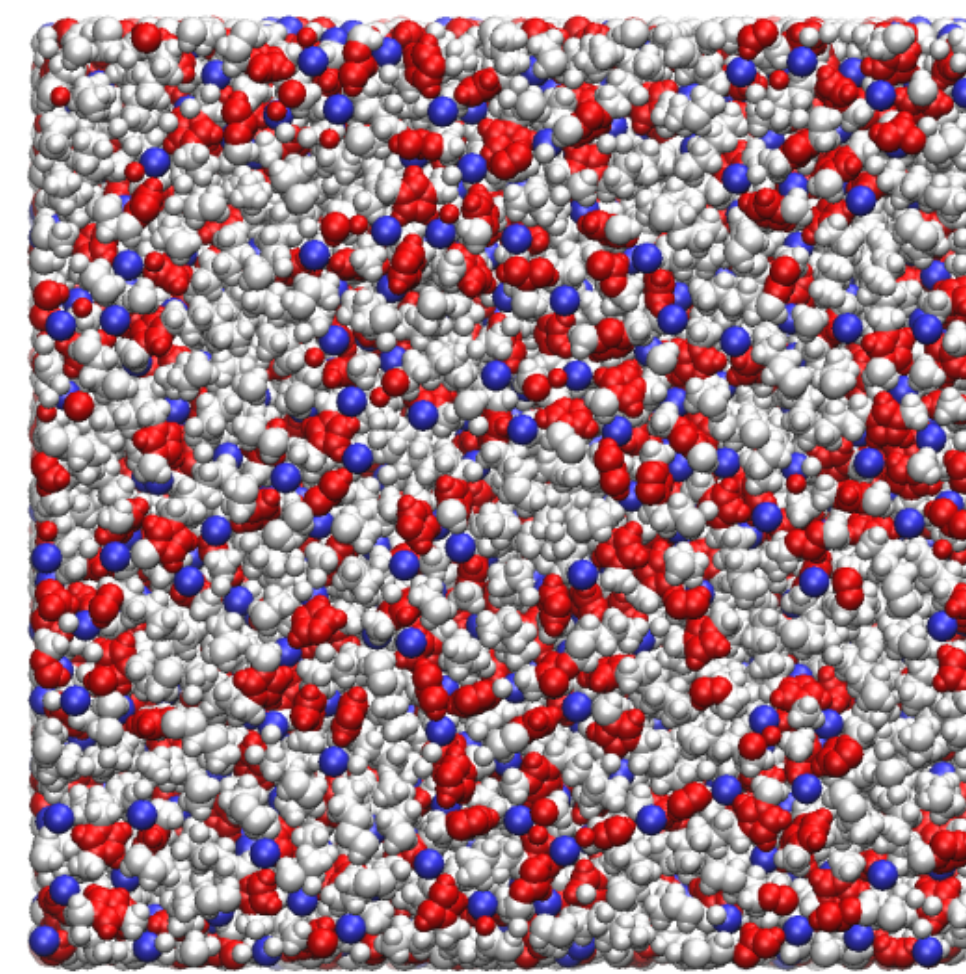
1. イントロダクション：分子動力学 (MD) シミュレーションを用いた輸送物性解析

熔融塩やイオン液体などの無機材料系は、優れたイオン伝導特性から電解質としての用途が広く提案され、実用化はガラスや結晶による固体電解質にまで及ぶ。現在これらの材料設計の指針を得るために、輸送物性の指標化が進められており、近年ではマテリアル・インフォマティクスの進展も相まって、基礎科学的なデータの拡充が要請されている。



機能性イオン液体
中性分子の存在によって
低融点でも優れたイオン
伝導特性を示す

⇒ 中性分子の役割は？
構造ゆらぎを形成する？



長鎖疎水基によるナノ構造
長鎖疎水基が局所的に会合して
ナノ構造を形成し、組成によっ
ては液晶相転移を発現する

⇒ 構造ゆらぎの役割は？
構造スケールは制御可能？

2. 本研究の目的：イオン液晶のナノスケールの自己組織化様態と分子輸送特性

自己組織化イオン液晶がもつ分子輸送特性におけるナノ相分離様態の機能を分子動力学シミュレーションで調べる。特に、液晶相を透過する分子特性を明らかにするため、古典力学と量子計算を併用した分子モデルの新規開発と電子状態解析に着眼し、液晶膜内で分子の拡散性と安定性を支配する物理因子を調べる。さらに、自己組織化したナノ相分離系における物性の空間分割解析法を新たに開発し、“濃度・密度・電荷のナノ相分離溶液”における分子のダイナミクスを明らかにする。そのため本研究では、液晶相における様々なナノ相分離様態の解析を経て、実験結果に則した分子モデルを決定し、分子輸送特性と自己組織化様態の関係を議論する。

3. 研究内容の紹介：イオン液体の分子モデリングと輸送係数の物性予測

