

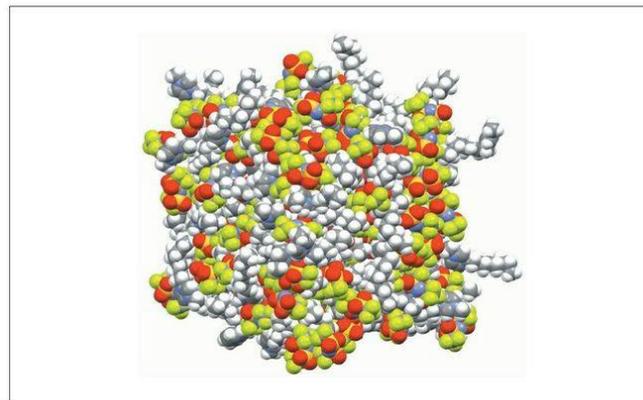
# 計算化学手法を用いたイオン液体の研究： イオン間相互作用とイオンの輸送物性

講演者：都築誠二先生

産業技術総合研究所  
ナノシステム研究部門  
ソフトマターモデリンググループ  
上級主任研究員

日時：12月18日(木)16:40～18:10

場所：立教大学 4号館 4339教室



分子動力学法で計算したイオン液体の構造

イオン液体はイオンだけからなる液体だが、イオン伝導性、難揮発性、難燃性、良好な電気化学的安定性などの性質を持つことからリチウム系二次電池の安全性を材料面から支える新しい電解質として、活発な研究が進められている。イオン液体は分子性の液体と比べて粘度が大きく、電解質に利用するには粘度を下げる必要がある。カチオンとアニオンの組み合わせにより液体物性が変化することからイオン液体はデザイナー液体とも呼ばれており、適切なイオンを組み合わせればリチウム系二次電池に適した電解質を合成できる可能性がある。計算化学手法でイオン液体の物性を予測できれば、電解質に適したイオン液体を効率的に開発できる可能性がある。●本講演では *ab initio* 分子軌道法を用いたイオン間相互作用の解析、古典分子動力学法を用いたイオン液体中のイオンの拡散のシミュレーション、イオンの拡散を支配する要因の研究について紹介する。また、リチウム系二次電池に用いるイオン液体電解質の研究における、計算化学への期待についても触れる。

担当：望月(fullmoon@rikkyo.ac.jp)