

# イオン液体界面のシミュレーション

大阪大学大学院基礎工学研究科 大戸達彦

**目的** イオン液体と空気あるいはグラフェンとの界面での分子配向を明らかにする。

**内容** 第一原理分子動力学法(AIMD)を初めてイオン液体界面に適用し、界面の配向解析を行う。

**結果** 界面のイオン液体にはアニオン・カチオン濃度の交代が見られるが、AIMDでは分極なしの古典力場同様の遅い構造緩和が見られ、それが $\pi$ - $\pi$ スタッキングの違いによることを明らかにした。

利用した計算機

ノード時間  
使用メモリ  
並列化

VCC

21000時間  
64GB  
640並列

