

イオン液体を混合したセルロース誘導体の固体高分子電解質におけるイオン輸送過程に対する分子動力学シミュレーション

(早大院先進理工¹・早大理工総研²・BRIN, Indonesia³・早大国際理工学センター⁴)

○石田賢亮¹, 中井浩巳¹², Sun Theo C. L. Ndruru³, Aditya Wibawa Sakti⁴

Molecular Dynamics Simulation of Ion Transport in Ionic Liquid Incorporated Solid Polymer Electrolyte of Cellulose Derivative (¹ School of Advanced Science and Engineering, Waseda University, ² Waseda Research Institute for Science and Engineering, Waseda University, ³ BRIN, Indonesia, ⁴ Global Center for Science and Engineering, Waseda University)

○Kensuke Ishida,¹ Hiromi Nakai,¹² Sun Theo C. L. Ndruru³, Aditya Wibawa Sakti⁴

Solid polymer electrolytes (SPEs) of cellulose and their derivatives are known for the next generation Li-ion batteries as they are safe and environmentally friendly. Incorporating ionic liquid is known to improve the ionic conductivity of SPEs [1]. In this study, molecular dynamics simulations for the ionic liquid incorporated SPEs of cellulose derivatives were performed to investigate the ion diffusion mechanism. Amorphous models of methyl cellulose and carboxymethyl cellulose with different ratios of [EMIM⁺][CH₃COO⁻] and LiClO₄ salts were chosen to be representative systems. GROMACS code [2] was used for simulations. Fig. 1 shows the coordination number of oxygen to Li-ion in the average of 10 trajectories of 50 ns NVT ensemble. The coordination number of acetates increases and others decreases as the ratio of ionic liquid increases. Li-ion is attracted by acetate and loses interaction with polymers and ClO₄⁻. The results for the simulations with electric fields will also be reported.

Keywords : Li-ion battery, Solid polymer electrolyte, Cellulose derivative, Ionic liquid, Molecular dynamics simulation

セルロースとその誘導体を用いた固体高分子電解質 (SPEs) はその安全性や環境負荷の低さから次世代のリチウム電池材料として注目されている。またイオン液体の混合によって SPEs のイオン伝導度が向上することが知られている [1]。本研究では、イオン液体を混合したセルロース SPEs 中のイオン伝導メカニズムの解明を目的として分子動力学シミュレーションを行った。計算モデルは、異なる濃度の [EMIM⁺][CH₃COO⁻] を含むアモルファス系のメチルセルロース (MC)、カルボキシメチルセルロース (CMC) の電解質に LiClO₄ 塩を加えた系とした。計算には GROMACS [2] を使用した。

図 1 に 50 ns の本計算における Li イオンに対する周辺分子の配位数を示す。データは 10 本のトラジェクトリの平均値である。イオン液体の濃度が大きくなるほどアセテートの配位数が増加し、ポリマーと ClO₄⁻ の配位数が減少することが分かった。イオン液体の混合により、Li イオンがアセテートに引き付けられてポリマーや ClO₄⁻ から解離することが示唆された。発表では電場を印加した系についても報告する。

[1] Y. Kumar et al., *Solid State Ion.*, **201**, 73 (2011). [2] M. J. Abraham et al., *SoftwareX*, **1-2**, 19 (2015).

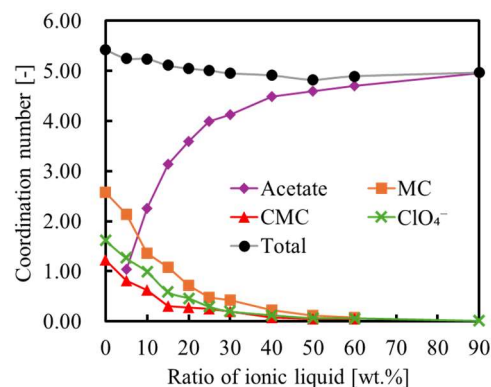


Fig. 1. Coordination number of oxygen atoms of acetate, polymers, and ClO₄⁻.