

# Диффузия в ионных жидкостях. Исследование методом классической молекулярной динамики

Ивановский Г.Е., Стегайлов В.В.

Ионные жидкости — это расплавы обычно органических солей с температурой плавления ниже 100°C. Неправильная форма ионов приводит к меньшей энергии связи в кристаллическом состоянии и понижению температуры плавления. Их органическая природа позволяет тонко подстраивать свойства ионной жидкости под конкретную задачу.

Ионные жидкости используются как электролиты в суперконденсаторах и батареях. Помимо высокой энергетической емкости, сравнимой с удельной емкостью химических источников тока, суперконденсаторы обладают также временами зарядки/разрядки, практически не уступающими обычным конденсаторам. Кроме того, суперконденсатор практически не деградирует при зарядке/разрядке.

Использование ионных жидкостей в качестве электролита суперконденсаторов порождает ряд исследовательских задач. В частности, нужно исследовать диффузионные и вязкостные свойства ионной жидкости в пористой структуре электрода, поскольку именно они определяют времена зарядки/разрядки устройства. Системы, состоящие из ионной жидкости и электрода, сложны для описания и требуют применения квантовых подходов. В данной работе с использованием метода классической молекулярной динамики изучаются диффузионные характеристики системы, состоящей только из ионной жидкости.

Исследовались две ионные жидкости: тетрафторборат 1-бутил-3-метилимидазолия ( $[bmim]^+[BF_4]^-$ ) и тетрафторборат N-метил-N,N,N-триэтиламмония ( $[tema]^+[BF_4]^-$ ). Были получены данные, свидетельствующие о нетипичной временной зависимости среднеквадратичного смещения центров масс ионов. Обнаружен длительный переход между баллистическим режимом и диффузией по закону Эйнштейна—Смолуховского. Особое внимание в работе уделено количественной оценке статистических погрешностей результатов моделирования.