

## Отчет по гранту

### Фонда поддержки молодых ученых ОИВТ РАН

Получатель: Ивановский Глебс

Подразделение: Лаборатория 1.4.1. НИЦ-1 ТЭС

Научный руководитель: Стегайлов Владимир Владимирович

### Моделирование ионных жидкостей.

#### Расчет равновесных свойств и динамических характеристик

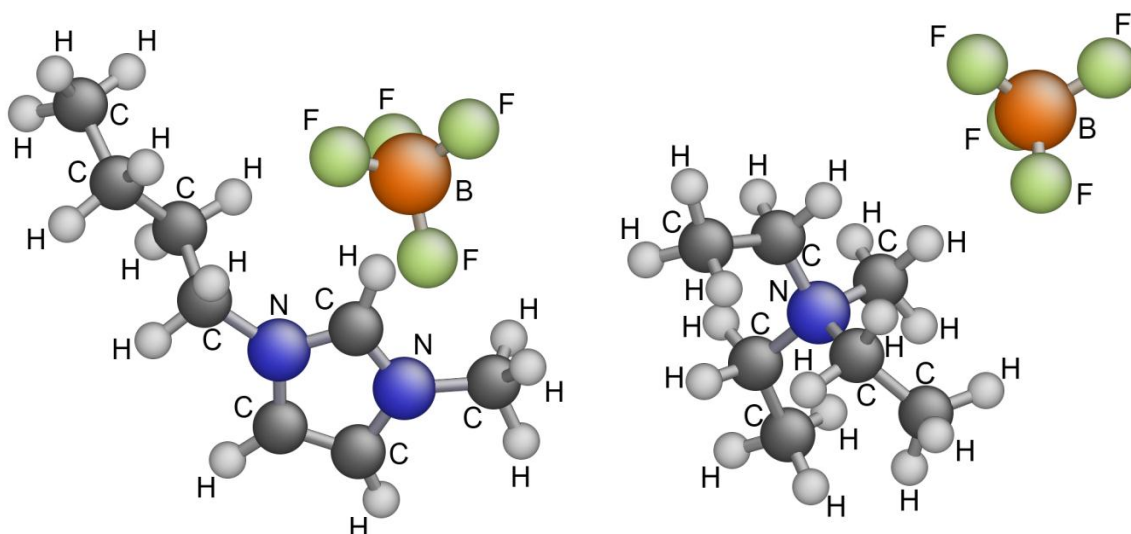
##### Постановка задачи

Целью проекта является построение модели взаимодействия ионной жидкости с углеродным материалом и изучение динамических процессов в равновесных и неравновесных состояниях этой системы. Это подразумевает определение и проверку потенциалов взаимодействия, осмысленный выбор числа частиц в расчетах, проведение молекулярно-динамических расчетов, анализ результатов и их сравнение с доступными экспериментальными данными.

Работы направлены на решение следующих проблем:

1. определения коэффициентов диффузии ионов, влияющих на процессы зарядки и разрядки суперконденсаторов;
2. изучения поведения ионной жидкости вблизи поверхности углеродного материала и способности ионов электролита заполнять поры электрода;
3. исследования зависимости удельной емкости суперконденсатора от структуры углеродного электрода и типа применяемого электролита.

В более отдаленной перспективе это должно помочь выработать рекомендации производителям суперконденсаторов по выбору электролита и материала для электродов.



## Результаты

В рамках данной работы с помощью метода классической молекулярной динамики изучаются диффузионные процессы в двух ионных жидкостях: тетрафторборате 1-бутил-3-метилимидазолия ( $[\text{C}_8\text{H}_{15}\text{N}_2]^+[\text{BF}_4]^-$ , на рисунке слева) и тетрафторборате N,N,N-триэтил-N-метиламмония ( $[\text{C}_7\text{H}_{18}\text{N}]^+[\text{BF}_4]^-$ , на рисунке справа).

Часть плана, посвященная исследованию процессов диффузии в ионных жидкостях, успешно выполнена. Достигнут значительный прогресс в понимании аномальной диффузии. Получены важные сведения и навыки для работы с ионными жидкостями и другими системами с явно выраженным дальнедействующим электростатическим взаимодействием.

Аномальная диффузия может быть описана модифицированной моделью случайных блужданий, в которой длина шага и временная задержка между шагами не являются постоянными, а обладают некоторыми функциями распределения. В большинстве случаев процесс случайных блужданий хорошо описывается классической теорией, в которой постоянные длина шага и задержка полагаются равными средним значениям реальных распределений. Однако в случае «распределений с тяжелыми хвостами» (распределение Парето и т.п.) такой подход неприемлем, поскольку у таких распределений нет конечного значения дисперсии, и может не быть конечного среднего значения. Такие распределения могут приводить к супер- и субдиффузии.

В ходе изучения стохастических свойств систем из многоатомных молекул ионной жидкости была обнаружена не только неустойчивость (по отношению к изменению шага интегрирования) траекторий отдельных частиц, но и усредненного по ансамблю из 125 пар ионов смещению центров масс молекул. Из этого следует крайняя необходимость усреднения по независимым траекториям.

Молекулярное моделирование кулоновских систем с целью получения надежных и достоверных результатов требует особо тщательного подхода к усреднению результатов. Соответствующие методы усреднения реализованы в виде программ, которые используются для обработки молекулярно-динамических траекторий в полуавтоматическом режиме. Применяемые методы диагностики постоянно совершенствуются, расширяются функциональные возможности, это отражается в программном коде.

Текущие результаты докладывались на нескольких конференциях, по результатам работы написана статья в Доклады Академии Наук. Изучение диффузионных процессов продолжаются, готовится расширенная публикация по этой тематике.

Часть плана, касающаяся описания взаимодействия электролита на основе ионной жидкости с электродом суперконденсатора, не была реализована, но по-прежнему остается приоритетной задачей. Накопленные знания о поведении молекул в объеме ионной жидкости, имеющиеся успехи Александра Ланкина в квантовом молекулярно-динамическом моделировании простых систем электрод-электролит и имеющийся у отдела опыт построения потенциалов на основе расчетов из первых принципов позволяют начать работу по этому направлению в ближайшее время.

## Перечень публикаций

### В реферируемых журналах

1. *Ивановскис Г., Норман Г.Э., Усманова Д.Р.* Аномальная диффузия в ионных жидкостях. Исследование методом молекулярной динамики // ДАН. 2012. № 2. Т. 447.

### В сборниках трудов и тезисах конференций

2. *Ivanovskis G., Norman G.E., Stegailov V.V., Usmanova D.R.* Anomalous Diffusivity of Ionic Liquids. Classical Molecular Dynamics Study // Physics of Extreme State for Matter - 2012 - Черноголовка, 2012, С. 141-143.

### Выступления

1. *Ивановскис Г.* Диффузия в ионных жидкостях. Исследование методом классической молекулярной динамики // Научно-координационная Сессия «Исследования неидеальной плазмы», 23-24 ноября 2011 г., Москва (стендовый доклад)
2. *Ивановскис Г.* Диффузия в ионных жидкостях. Исследование методом классической молекулярной динамики // 54-я научная конференция МФТИ «Проблемы фундаментальных и прикладных естественных и технических наук в современном информационном обществе», 10-30 ноября 2011 г., Долгопрудный (устный доклад)
3. *Ivanovskis G., Norman G.E., Stegailov V.V., Usmanova D.R.* Anomalous Diffusivity of Ionic Liquids. Classical Molecular Dynamics Study // XXVII International Conference on Equations of State for Matter, 1-6 марта 2012 г., п. Эльбрус, Кабардино-Балкария (устный доклад)
4. *Ivanovskis G., Norman G.E., Stegailov V.V., Usmanova D.R.* Diffusion in Ionic Liquids. Classical Molecular Dynamic Study // 10<sup>th</sup> Workshop «Complex Systems of Charged Particles and Their Interaction with Electromagnetic Radiation», 19-20 апреля 2012 г., Москва (устный доклад)
5. *Ивановскис Г., Норман Г.Э., Стегайлов В.В., Усманова Д.Р.* Аномальная диффузия в ионных жидкостях. Исследование методом классической молекулярной динамики // 4-я Всероссийская конференция «Фундаментальные основы МЭМС- и нанотехнологий», 6–8 июня 2012 г., Новосибирск (устный доклад)