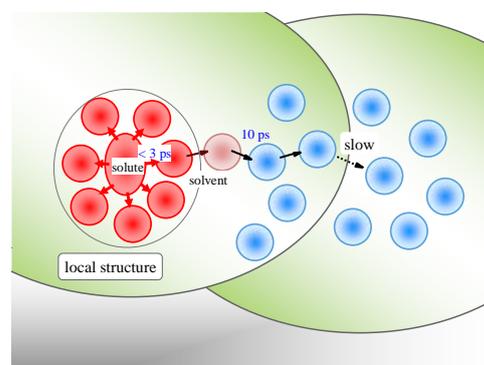


ディビジョン番号	1
ディビジョン名	物理化学

大項目	3. 凝縮系の物性と機能
中項目	3-5. イオン液体
小項目	3-5-9. イオン液体のダイナミクス (時間階層性を中心に)

概要 (200字以内)

イオン液体の示す緩和現象は、数十フェムト秒から分・時間にいたる幅広い時間領域で観測される。この多様な時間依存性を統一的に理解するためには、イオン液体の構造の解明が不可欠である。イオン液体の動力学の解明は、現代の物理化学にとって困難ではあるが重要かつ魅力的な研究課題である。この課題に対する解答を得ることが、化学反応場としてのイオン液体の特性を理解して、最適な反応場を提案することにつながる。



現状と最前線

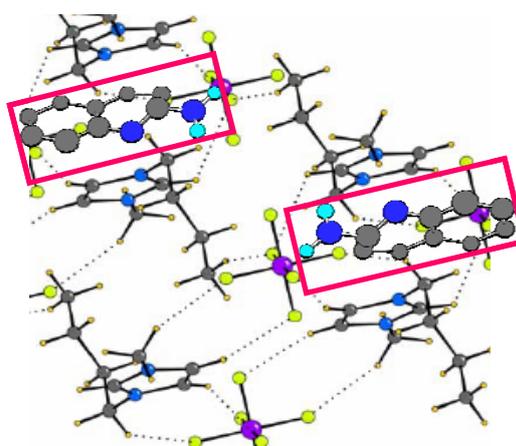
イオン液体は、数十フェムト秒から分・時間・あるいは日までのきわめて幅広い時間領域で多様な緩和現象を示す。「イオン液体のダイナミクス」の全体像を明らかにするためには、それぞれの時間領域でのダイナミクスの研究に適した実験法および計算法を駆使した総合的なアプローチが要求される。イオン液体のダイナミクスの解明は、現代の物理化学の総力を挙げて取り組むべき困難な課題であると同時に、それだけの価値のある魅力的な研究課題であるといえる。

通常分子液体とイオン液体を比較した場合、一般的にイオン液体の方がより複雑なダイナミクスを示す。イオン液体において得られる各種の緩和時間は分子液体のものよりも長い場合が多い。イオン液体での「運動の記憶」が分子液体よりも長く持続するといえる。最近、このようなイオン液体における運動の特異性がイオン液体での「局所構造」の存在に起因すると考える研究者が増えている。イオン液体中に存在する正および負の単極子、および液晶分子や界面活性剤と似た正イオンの構造から考えて、イミダゾリウム系イオン液体において何らかの秩序構造が存在する可能性は大きいであろう。

イオン液体の融解や凝固の際には大きなヒステリシスがしばしば見られる。イオン液体を系として考えた場合、その系が室温で熱平衡状態に達するまでにどのくらいの時間を要するかは、依然として不明である。長時間のダイナミクスを解明するためには、熱測定や分光測定の

結果を矛盾なく説明できる構造モデルを検討することが不可欠な作業となる。

構造についての検討が必須となるのは、ピコ秒からフェムト秒領域における超高速ダイナミクスの解明に際しても同様である。この時間領域におけるダイナミクスでは、イオン液体中での分子（あるいはイオン）の回転および並進運動、および振動エネルギー緩和過程とそれに伴った分子（イオン）間エネルギー移動過程が重要である。



分子液体の場合、ピコ秒領域の回転運動は、時間分解けい光分光法や時間分解可視吸収分光法、および過渡回折格子法などの方法によって観測される。イオン液体中での超高速ダイナミクスが近年多く報告されるようになったが、その多くは比較的容易な時間分解けい光分光法による実験の結果である。ピコ秒時間分解けい光分光法では、最近、分子液体中での回転緩和速度と溶媒の粘度との相関関係から予想されるより 10 倍も小さい回転緩和速度を示す例が報告された。この結果を説明するために、けい光プローブ分子がイミダゾリウム系イオン液体の形成する局所構造中に溶媒和されているという構造モデル（上図）が提案された。

イオン液体中におけるエネルギー移動速度や *trans*-スチルベンの光異性化反応速度が、分子液体の場合にそれぞれ観測される溶媒の熱拡散定数や粘度との相関を示さないことも明らかになった。これらの実験結果は、イオン液体では、熱拡散定数や粘度という溶媒の巨視的物性量が分子レベルでの溶媒環境のよい指標になっていないことを意味する。この事実も、イオン液体中の超高速動力学が局所構造によって大きな影響を受けることを示唆している。

将来予測と方向性

・ 5 年後までに解決・実現が望まれる課題

イオン液体の局所構造が存在する場合はその大きさや時間変化についての半定量的モデルを得る。この構造モデルと矛盾のないダイナミクスの描像を構築する。

・ 10 年後までに解決・実現が望まれる課題

フェムト秒から分・時間までのダイナミクスを統一的に理解する。ダイナミクスを通じて化学反応場としてのイオン液体の特性を理解し、個々の反応に対して最適な反応場を提案する。

キーワード

局所構造、時間分解測定、フェムト秒・分・時間、熱平衡

(執筆者： 岩田 耕一)