

平成 21 年 5 月 22 日現在

研究種目：基盤研究(B)

研究期間：2007 年度 ~ 2008 年度

課題番号：19350033

研究課題名（和文） イオン液体イオニクスの構造活性相関

研究課題名（英文） Structure and property relationship of ionic liquids ionics

研究代表者

梅林 泰宏 (YASUHIRO UMEBAYASHI)

九州大学・大学院理学研究院・准教授

研究者番号：90311836

研究成果の概要：

本研究は、イオン液体に分子論的にアプローチし、液体構造とダイナミクス・イオニクスの構造活性相関を明らかにすることを目的し、以下に挙げる研究を進めた。

- (1) 非プロトン性イオン液体の液体構造とダイナミクス
- (2) 非プロトン性イオン液体のリチウムイオン溶媒和とリチウムイオンイオニクス
- (3) プロトン性イオン液体の液体構造とプロトニクス

(1)では、X線散乱実験を分子動力学シミュレーションにより解析する手法を開発し、種々のイオン液体の液体構造解析を行った。また、Lopes(ポルトガル)と Pauda(フランス)らと共同でピロリジニウム系イオン液体の研究を行い、新たな陰イオンの力場を開発した。(2)では、Raman 分光および DFT 計算から、リチウムイオンを含む一連のアルカリ金属イオンの溶媒和構造を解明した。また、関(電中研)と早水(早水)らと共同で低粘性イオン液体中のリチウムイオンのイオン伝導度や粘度、自己拡散係数を決定し、リチウムイオンの溶媒和構造とダイナミクスの相関を明らかにした。(3)では、種々のプロトン性イオン液体の力場を新たに開発し、実験および理論の両面から液体構造を原子レベルで解明することに成功した。

本研究の特筆すべき成果は、イオン液体に特異的で最も最も注目されているナノ相分離液体構造を分子レベルで明らかにしたものである。従来知られている非プロトン性イオン液体に比べ、ナノ相分離構造形成がより促進されていることを見出した。シミュレーション解析を行ったところ、イオン液体の持つ自己疎溶媒的な性質に基づくことを明らかにした。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2007 年度	5,000,000	1,500,000	6,500,000
2008 年度	2,200,000	660,000	2,860,000
年度			
年度			
年度			
総計	7,200,000	2,160,000	9,360,000

研究分野：

科研費の分科・細目：化学・無機化学

キーワード：イオン液体・X線散乱実験・分子動力学シミュレーション・Raman 分光・DFT 計算・液体構造・ダイナミクス・構造活性相関

## 1. 研究開始当初の背景

イオン液体は、イオンからなる融点 100°C 以下の有機電解質であり、蒸気圧が無視できる低環境負荷溶媒として注目されている。応用は溶媒にとどまらず、ユビキタス蓄電・発電デバイスや分離・抽出メディアなど多岐に渡るものの、粘性が非常に高いため、反応や分配速度、導電性の点で低粘性化が重要な課題である。

イオン液体の基礎科学研究も数年で急速に増加しており、理論研究や溶媒・溶媒和ダイナミクスの実験研究も報告されているが十分ではない。広角中性子・X 線散乱実験 (LANS・LAXS) は、2 体相関関数や動径分布関数を与え、マクロ物性である粘度や導電性ならびに溶媒・溶媒和ダイナミクスを理解する基盤となるにも関わらず不足している。

一方、イオン間に強い電荷間相互作用が働くにも関わらず融点が低いことから、多様なイオン間配向と柔らかいアルキル基による大きなエントロピーが低融点の起源と考えられている。申請者らは、エチル-メチルイミダゾリウム陽イオン ( $C_2mIm^+$ ) の異性化を見出し、環状 4 級アンモニウムイオン液体では、環異性化があることを明らかにした。低融点・低粘性イオン液体を与えるビス-トリフルオロメタンスルホン酸イミド陰イオン (TFSA<sup>-</sup>) に配座異性平衡があることを世界に先駆けて見出した。

申請者らは、配座異性と液体構造の関係を明らかにするため LAXS 実験を試みた。イオン液体は分子構造が複雑であり動径分布関数の解析は困難を極めた。LAXS 実験と分子動力学(MD)シミュレーションを組み合わせ、構造因子および動径分布関数の解析に成功した。実験と MD はよく一致し、MD による自己拡散係数も定性的に妥当であった。 $C_2mIm^+$  イオン周りの陰イオンの存在確率を計算し空間的にプロットすると、エチル基-イミダゾリウム環近傍の空間で陰イオンの存在確率が異性体で大きく異なり、陽イオン周りの陰イオン配向がエチル基のねじれ運動と同期していることを見出した。

## 2. 研究の目的

イオン液体応用の最重要課題は、低粘性化(ダイナミクス)や導電性向上(イオニクス)である。本研究では、イオン液体に分子論的にアプローチし、液体構造とダイナミクス・イオニクスの構造活性相関を明らかにすることを目的とした。イオン液体は、狭義の水素結合の有無でプロトン性と非プロトン性に、イオン液体単体イオニクスと混合系イオニ

クスに分類できる。これらの分類に従い、本研究は以下に挙げる研究を進め、構造活性相関を解明することを具体的な目標とした。

- (1) 非プロトン性イオン液体の液体構造とダイナミクス
- (2) 非プロトン性イオン液体のリチウムイオン溶媒和とリチウムイオンイオニクス
- (3) プロトン性イオン液体の液体構造とプロトニクス

## 3. 研究の方法

イオン液体の単結晶構造解析も多く報告されているが、結晶構造からの議論は本質を見失いかねない。本研究は、分子構造・液体構造の精密解析技術を基盤とし、分子レベルでダイナミクス・イオニクスとの構造活性相関を明らかにする。しかし、分子構造が単純な分子性液体や無機溶融塩と異なり複雑な分子構造のイオン液体の液体構造解析には、新たな方法論が不可欠である。

本研究では、X 線回折測定と MD を組み合わせる新たな液体構造解析法を適用する。イオン液体の MD 研究で世界をリードする Lopes と Pádua らと共同でポテンシャル構築と解析を行う。実験的には広い散乱ベクトル空間の測定が有効であり、実験室規模 LAXS では高エネルギー Ag 特性 X 線の利用や SPring-8 実験を行う。

イオン液体の液体構造を精密に解析するには、液体での分子構造を精密に理解することが肝要である。申請者らは、Raman 分光と DFT 計算でイオン液体の異性化平衡解析に実績を有しておりこれを適用する。さらに、金属イオンを含むイオン液体の応用は、ルイス酸触媒やナノ粒子合成、電気化学デバイス、分離・抽出など多岐にわたり非常に多くの報告があるものの、構造活性相関の基礎的知見である溶媒和構造が全く未知である。この問題にも Raman 分光と DFT 計算が有効である。

イオン液体の電位窓や電動度は蓄積されており交流インピーダンス法が有効である。また、リチウムイオンおよびプロトンのイオニクスでは、溶媒イオンの電動を抑え、リチウムやプロトンによる電動か向上することが望ましい。交流インピーダンス法は輸率が決定でき、イオン液体のイオニクスのメカニズムが解明できる。また、パルス磁場勾配 NMR はイオン液体陽イオン・陰イオンに加え、<sup>7</sup>Li 核の観測でリチウムイオンの自己拡散係数を決定できる。これらは協力関係にある関(電中研)と早水(産総研)らと共同して研究を進める。

#### 4. 研究成果

##### (1) 非プロトン性イオン液体の液体構造とダイナミクス

最も典型的なイミダゾリウム系について、陰イオン TFSA (bis-(trifluoromethanesulfonyl amide))からなるイオン液体の液体構造を X 線散乱実験で調べた。TFSA は、分子量が大きいものの粘性が低く液体構造と粘性の関数に興味もたれる。一方で、HTFSA は超強酸であり、陽イオン-陰イオン間相互作用ではイミダゾリウム C2 プロトンとの水素結合が重要と考えられていた。

X 線散乱実験から得られた構造因子および動径分布関数は、Lopes と Padua らの力場を用いたシミュレーションで非常によく再現されることが明らかとなった。このことは、実験では、系に含まれる全ての原子対に由来する X 線の干渉パターンの和しか観測できないものの、十分に信頼性の高い力場を用いたシミュレーションにより、各原子対からの干渉を抽出できることを意味している。

シミュレーションからイミダゾリウム陽イオンを構成するそれぞれの炭素原子と TFSA 酸素およびフッ素原子の部分 2 体相関関数が求められ、TFSA は、最も短い距離で C2 プロトンと相互作用するものの、分布確率は N-メチル基の周りで最も高いことが明らかにされた。さらに、酸素原子は、部分電荷の高い炭素原子周辺に分布するが、フッ素原子はむしろ電荷の小さな原子に分布する。これは、酸素原子が静電相互作用を好むのに対し、フッ素原子は van der Waals 相互作用を好むことを強く示唆している。

実際、イミダゾリウム C2 プロトンを原点とし 3 次元的に TFSA の存在確率をプロットする空間分布関数(SDF)では、TFSA は C2 プロトン近傍にほとんど分布せず、イミダゾリウム環の上下と C4 および C5 プロトン近傍に高い分布を示した。以上から、TFSA はイミダゾリウム C2 プロトンと水素結合するとする従来の考えが否定された。

さらに、C2 プロトンとの相互作用を明らかにするため、イミダゾリウムの C2 位をメチル基で置換したイオン液体について、X 線散乱実験およびシミュレーションにより調べた。シミュレーションでは、メチル化イミダゾリウムの力場を新たに構築した。X 線散乱実験で得られる構造因子では、C2-プロトンをメチル化すると、第 1 ピーク、第 2 ピークともピーク位置が殆ど変化しないものの、ピーク強度が変化し、これは最近接の陽イオン-陰イオン間配向が変化することを示唆している。構造因子をフーリエ変換して得られる動径分布関数ではこの変化が顕著に現れた。実際、シミュレーションは実験による構造因子および動径分布関数をよく再現し、空間分布関数から最近接イオン間配向の変化

が明らかにされた。メチル化イミダゾリウムは、C2 位での相互作用が弱いものの粘性はむしろ増加する。実際、X 線散乱実験で観測される長距離秩序構造は、イミダゾリウムと類似している。イオン液体の長距離秩序構造は粘性を反映しているのかもしれない。

同様に、BF<sub>4</sub> からなるイオン液体についても調べた。イミダゾリウムイオンは、エチル基の配座で planar 体と non planar 対が平衡で存在する。それぞれを共存させたシミュレーションを行ったところ、BF<sub>4</sub> イオンの存在確率が異性体により異なることが明らかにされた。このことは、イオン液体を構成するイオンの異性化平衡が液体構造と関連しており、イオン間配置の多様性を生み出していることを示唆している。これはイオン液体が低い融点をもつ一因に違いない。

##### (2) 非プロトン性イオン液体のリチウムイオン溶媒和とリチウムイオンイオニクス

イオン液体は実質的に蒸気がなく引火性が小さい。したがって、電気化学デバイスへの応用では高い安全性を持つ電池・キャパシタの開発が期待できる。しかし、高い粘性はリチウムイオンなどの電荷移動を困難にする。リチウムイオンのイオン伝導では、イオン液体バルク液体構造に加え、リチウムイオンの溶媒和構造もまた重要となる。そこで、Raman 分光及び DFT 計算を行い、最も典型的なイオン液体である[C<sub>2</sub>mim][TFSA]および[C<sub>4</sub>Pyrr][TFSA]中のリチウムイオンの溶媒和構造を調べた。

Raman スペクトルのリチウムイオン濃度依存性を解析し、TFSA の配位数は 2 と決定された。リチウムイオンは水や非水溶媒中で 4 配位構造を好むことが知られており、TFSA は、異なる SO<sub>2</sub> 基に属す酸素原子によって 2 座配位すると考えられる。また、TFSA は異性化平衡があり、cis 体と trans 体が平衡で存在する。リチウムイオン濃度の増加に伴い、バルクイオン液体で安定な trans 体が減少し、cis 体が増加することが示唆された。リチウムイオンに 2 分子の TFSA が溶媒和したイオンクラスターについて DFT 計算を行ったところ、リチウムイオンに配位した TFSA は cis 体が安定であることが示唆された。

最近、さらに精密な測定を行い種々の補正を施した Raman スペクトルを解析したところ、バルクおよびリチウムイオン最近接 TFSA それぞれの異性化熱力学パラメータの決定に成功した。高精度量子化学計算の結果は、実験で決定されたエンタルピーをよく再現し、リチウムイオンに溶媒和した TFSA は cis 体が安定であることが定量的に示された。

さらに、イオン液体中の金属イオン溶媒和をより統一的な見地から理解するために、種々のアルカリ金属イオンおよび第 1 遷移金属イオンの溶媒和構造を調べた。これらの金属イオンの配位数は、水や非水溶液で知られているものとはほぼ等し

いことが明らかにされた。また、アルカリ金属イオンでは、金属イオンに溶媒和した TFSA の Raman バンドのシフト値とイオン半径による相関があることを見出した。このことは、金属イオンと TFSA の相互作用では静電相互作用の寄与が大きいことを示唆している。さらに、リチウムイオン溶媒和で見出されたイオン近傍での cis 体の安定化は、イオン半径の増加に伴い消失することを見出した。

さらに、関(電中研)や早水(産総研)らと共同で新規ピラゾリウム系イオン液体およびそのリチウム溶液について、イオン伝導度、粘度、自己拡散係数の決定を行うとともに、高エネルギー X 線回折実験(HEXRD)を行った。これらの解析には、独自に力場を開発しシミュレーションを行った。実験及びシミュレーションの結果から、ピラゾリウムは、アニオンとの相互作用で重要な働きをする活性環プロトンが少ないことであることが示唆された。現在、更に詳細な解析を進めている。

### (3) プロトン性イオン液体の液体構造とプロトノクス

硝酸エチルアンモニウム  $C_2Am$  は、最も古くから知られている常温熔融塩であり、プロトン性イオン液体として比較よく調べられている。しかし、その液体構造は殆ど報告されていない。Atkin らの中性子小角散乱実験によれば、非常に小角な領域にピークを示し、アルキル鎖がエチル基と短いにもかかわらず、ナノ相分離構造を持つことが示唆された。申請者は、広角 X 線散乱実験を行い、新たに力場を開発して解析を行った。

シミュレーションは、実験的に決定された構造因子をよく再現し、 $C_2Am$  イオンと  $NO_3$  イオンの最近接相互作用では、狭義の水素結合である  $NH\cdots O$  相互作用だけでなく、弱い水素結合  $CH\cdots O$  相互作用も重要であることが明らかにされた。一方、末端メチル基間の部分 2 体相関関数から、末端メチル基間に相互作用が働くことを見出した。

ナノ相分離構造は、Lopes や Padua らのシミュレーション研究や Triolo らの X 線小角散乱実験から明らかにされ、現在、最も中も注目されている。すなわち、イオン液体のナノ相分離構造は溶媒和に重要な役割を果たし、イオン液体に特異的であると考えられている。Lopes らのシミュレーションと Triolo らの実験では、ナノ相分離を示す小角領域の特異的なピークはアルキル鎖間の長距離相関に帰属されている。

このことを確かめるため、一連のアルキル鎖長を持つイミダゾリウム系イオン液体のアルキル基を重水素化した試料を調整し、中性子小角散乱実験に軽水素/重水素の同位体置換法を適用した。軽水素試料および重水素試料とも、アルキル鎖長が 6 以上の試料ではナノ相分離を示すピークが現れたが、ピー

ク位置や強度がわずかに異なっていた。重水素試料の散乱プロファイルから軽水素試料のそれを差し引いた差プロファイルでは、アルキル鎖長が 10 以下では、ナノ相分離を示す小角ピークがほぼ消失し、一方、アルキル鎖長 12 ではピークが現れた。このことは、ナノ相分離を表すとされる小角ピークがアルキル鎖会合の長距離秩序相関だけではなく、少なくとも 2 つ以上の長距離秩序相関に帰属できることを強く示唆している。シミュレーションにより、この小角ピークを与える長距離相関を陽イオン間、陽イオン-陰イオン間および陰イオン間に分離したところ、小角ピークは陰イオン間の長距離相関に帰属できることを見出した。

さらに、イオン液体ナノ相分離構造の分子論的起源を明らかにすることを目的として、陽イオンを 1-ヘキシル-3-メチルイミダゾリウム [ $C_6mIm$ ] に固定し、陰イオンを組み合わせたイオン液体および陰イオンを TFSA に、アルキル鎖をヘキシルに固定し、種々の陽イオン骨格構造からなるイオン液体について、HEXRD 実験を行った。陰イオン依存性では、ナノ相分離に特異的な小角ピークのピーク位置および強度の変化が小さいものの、 $[C_6mIm]$  イオンとの相互作用が大きい陰イオンほど小角ピークの強度が増加する傾向があった。陽イオン骨格を変化させた実験では、1 級アンモニウムである  $[C_6Am]$  が非常に高い小角ピークを与え、次いでプロトン性イミダゾリウムである  $[C_6Im]$  の順であった。その他の非プロトン性イオン液体ではピーク位置および強度ともにほぼ変化は見られなかった。 $[C_6Am]$  および  $[C_6Im]$  とも、陽イオン-陰イオン間の最近接相互作用は狭義の水素結合  $NH\cdots O$  相互作用であると考えられる。一方、 $NH$  プロトンの酸性は  $[C_6Im]$  の方が高く、 $NH\cdots O$  相互作用は  $[C_6Am]$  に比べ  $[C_6Im]$  の方が強いと考えられる。実際、 $NH$  プロトン上の部分電荷は前者で 0.30、後者で 0.39 である。

一見矛盾しているこの結果を説明するには、エンタルピックな相互作用だけでなく、エントロピックな相互作用を考慮する必要があることを示している。水中ミセルやベシクル形成の疎水相互作用では、会合反応であるにもかかわらずエントロピー変化が正であることがよく知られており、この要因の一つは、排除体積効果、すなわち、アルキル鎖間会合に伴い、疎水性水和していた水分子が解放されるためと考えられている。このとき、水分子は分子サイズが非常に小さいため、単位体積辺りに解放される分子数が大きくなる。したがって、水分子の分子サイズの小ささは、疎水相互作用の要因の一つと考えられている。

イオン液体陽イオンは、その分子構造から明らかなように両親媒性を持っている。ニ-

トイオン液体は無溶媒系とはいえ、水中における疎水性相互作用と同様のことがイオン液体にも適用できるのではないだろうか。つまり、イオン液体の陽イオン-陰イオン間相互作用では、骨格サイズが小さければ排除される対イオンの数が増す。われわれは、これをイオン液体に特異的な auto-solvophobic な性質と捉え、ナノ相分離の分子論的起源の一つと考えている。このことを定量的に説明するため、実験で調べた一連のイオン液体のシミュレーション解析を進めている。

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 24 件)

1. R. Kanzaki, Y. Umebayashi, S. Ishiguro et al., *Chem. Lett.*, 36, 684-685, (2007).
2. T. Sukizaki, Y. Umebayashi, S. Ishiguro et al., *Electrochem.*, 75, 628-634, (2007).
3. K. Fujii, S. Seki, Y. Umebayashi, S. Ishiguro et al., *J. Phys. Chem. B*, 111, 12829-12833, (2007).
4. Y. Umebayashi, K. Fujii, R. Kanzaki, S. Ishiguro et al., *J. Phys. Chem. B*, 111, 13028-13032, (2007).
5. M. Asada, Y. Umebayashi, S. Ishiguro et al., *J. Raman Spectrosc.*, 38, 417-426, (2007).
6. M. Asada, Y. Umebayashi, S. Ishiguro et al., *Anal. Sci.*, 23, 835-840, (2007).
7. M. Asada, Y. Umebayashi, S. Ishiguro et al., *J. Mol. Liq.*, 136, 138-146, (2007).
8. Y. Kameda, Y. Umebayashi, M. Takeuchi et al., *J. Phys. Chem. B*, 111, 6104-6109, (2007).
9. J. N. C. Lopes, A. A. H. Pádua, Y. Umebayashi et al., *J. Phys. Chem. B*, 112, 1465-1472, (2008).
10. K. Fujii, R. Kanzaki, Y. Umebayashi, S. Ishiguro et al., *J. Phys. Chem. B*, 112, 4329-4336, (2008).
11. J. N. C. Lopes, A. A. H. Padua, Y. Umebayashi, K. Fujii et al., *J. Phys. Chem. B*, 112, 9449-9455, (2008).
12. S. Fukuda, Y. Umebayashi, S. Ishiguro et al., *J. Mol. Liq.*, 143, 2-7, (2008).
13. K. Fujii, S. Shiro, Y. Umebayashi, S. Ishiguro et al., *J. Mol. Liq.*, 143, 64-69, (2008).
14. S. Seki, Y. Umebayashi, K. Hayamizu, S. Tsuzuki et al., *Chem. Commun.*, 5541-5543, (2008).
15. K. Fujii, Y. Umebayashi, S. Ishiguro et al., *Anal. Sci.*, 24, 1377-1380, (2008).
16. Y. Umebayashi, K. Fujii, S. Ishiguro et al., *Anal. Sci.*, 24, 1297-1304, (2008).
17. A. Shirai, K. Fujii, Y. Umebayashi, Y. Ikeda et al., *Anal. Sci.*, 24, 1291-1296, (2008).
18. R. Kanzaki, Y. Umebayashi, S. Ishiguro et al., *Anal. Sci.*, 24, 1347-1350, (2008).
19. Y. Umebayashi, R. Kanzaki, S. Ishiguro et al., *J. Comp. Chem., Jpn.*, 7, 125-134, (2008).
20. K. Fujii, Y. Umebayashi, S. Ishiguro et al., *Chem. Lett.*, 38, 340-341, (2009).
21. Y. Umebayashi, K. Fujii, H.-C. Chang et al., *J. Chem. Phys.*, 130, 124503-1 - 124503-6, (2009).
22. Y. Umebayashi, K. Fujii, S. Seki, J. N. C. Lopes, A. A. H. Pádua, et al., *J. Phys. Chem. B*, 113, 4338-4346, (2009).
23. S. Seki, K. Hayamizu, Y. Umebayashi, S. Tsuzuki et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 11, 3509-3511, (2009).
24. R. Kanzaki, Y. Umebayashi, S. Ishiguro et al., *J. Mol. Liq.*, 147, 77-82, (2009).

[学会発表] (計 15 件)

1. Liquid structure and Ion solvation of Room Temperature Ionic Liquids, Y. Umebayashi et al., International Symposium on Task-Specific Ionic Liquids, August 3-4, Keio University, Japan, (Invited).
2. Molecular and liquid structures of 1-ethyl-3-methylimidazolium ionic liquids with various anions, Y. Umebayashi, et al., 2nd International Congress on Ionic Liquids (COIL-2), August 5-10, Pacifico Yokohama, Yokohama, Japan, (Invited).
3. Lithium Ion Solvation in Bis-(trifluoromethanesulfonyl) Imide type Room Temperature Ionic Liquids – DFT Calculations and Raman Spectroscopic Study –, Y. Umebayashi, et al., 30th International Conference on Solution Chemistry, July, 16-20, Perth, Australia, (Oral).
4. Solvation Structure of Li<sup>+</sup> in Concentrated LiPF<sub>6</sub>-Propylene Carbonate Solutions – Time-of-Flight neutron diffraction and MD simulation –, M. Takeuchi, Y. Umebayashi et al., 30th International Conference on Solution Chemistry, July, 16-20, Perth, Australia, (Oral).
5. Conformational Equilibrium of Bis(fluorosulfonyl) Imide Anion in Room-Temperature Ionic Liquid, K. Fujii, Y. Umebayashi et al., 30th International Conference on Solution Chemistry, July, 16-20, Perth, Australia, (Oral).
6. Acidity and Basicity of Ionic Liquids of Onium Salt, Ryo Kanzaki, Y. Umebayashi et al., 30th International Conference on Solution Chemistry, July, 16-20, Perth,

- Australia, (Oral).
7. On the Conformation of N-alkyl-N-methylpyrrolidinium Bis-(trifluoromethanesulfonyl) Imide Room Temperature Ionic Liquids – DFT Calculations and Raman Spectroscopic Study –, Y. Umebayashi et al., 30th International Conference on Solution Chemistry, July, 16-20, Perth, Australia, (Poster).
  8. Relationships Between Molecular Structures and Electrochemical & Physicochemical Properties of Room-Temperature Ionic Liquids for High-Performance Lithium-Ion Secondary Batteries, S. Seki Y. Umebayashi et al., Conference on Molten Salts and Ionic Liquids (EUCHEM 2008), August 24-29, 2008, Copenhagen, Denmark, (Invited).
  9. Anion dependence of 1-butyl-3-methylimidazolium conformational isomerism studied by Raman spectroscopy and MD simulations, Y. Umebayashi et al., Conference on Molten Salts and Ionic Liquids (EUCHEM 2008), August 24-29, 2008, Copenhagen, Denmark, (Poster).
  10. Alkyl-Chain Dependence On Meso- And Micro-Scale Liquid Structure Of Imidazolium Based Room Temperature Ionic Liquid, K. Fujii, Y. Umebayashi et al., Conference on Molten Salts and Ionic Liquids (EUCHEM 2008), August 24-29, 2008, Copenhagen, Denmark, (Poster).
  11. Structural difference between imidazolium and pyrrolidinium ionic liquids revealed by X-ray diffraction and MD simulations, Y. Umebayashi et al., Annual Meeting of European/Japanese Molecular Liquid Group 2008 (EMLG/JMLG2008), 31 August - 4 September, 2008, Lisboa, Portugal, (Poster).
  12. Liquid Structure of Low-viscosity Ionic Liquid, 1-Ethyl-3-methylimidazolium Bis(fluorosulfonyl) Amide, K. Fujii, Y. Umebayashi et al., Annual Meeting of European/Japanese Molecular Liquid Group 2008 (EMLG/JMLG2008), 31 August - 4 September, 2008, Lisboa, Portugal, (Poster).
  13. The potential energy landscape of bis(fluorosulfonyl)amide, K. Shimizu, Y. Umebayashi et al., Annual Meeting of European/Japanese Molecular Liquid Group 2008 (EMLG/JMLG2008), 31 August - 4 September, 2008, Lisboa, Portugal, (Poster).

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

梅林 泰宏 (YASUHIRO UMEBAYASHI)

九州大学・大学院理学研究院・准教授

研究者番号：90311836