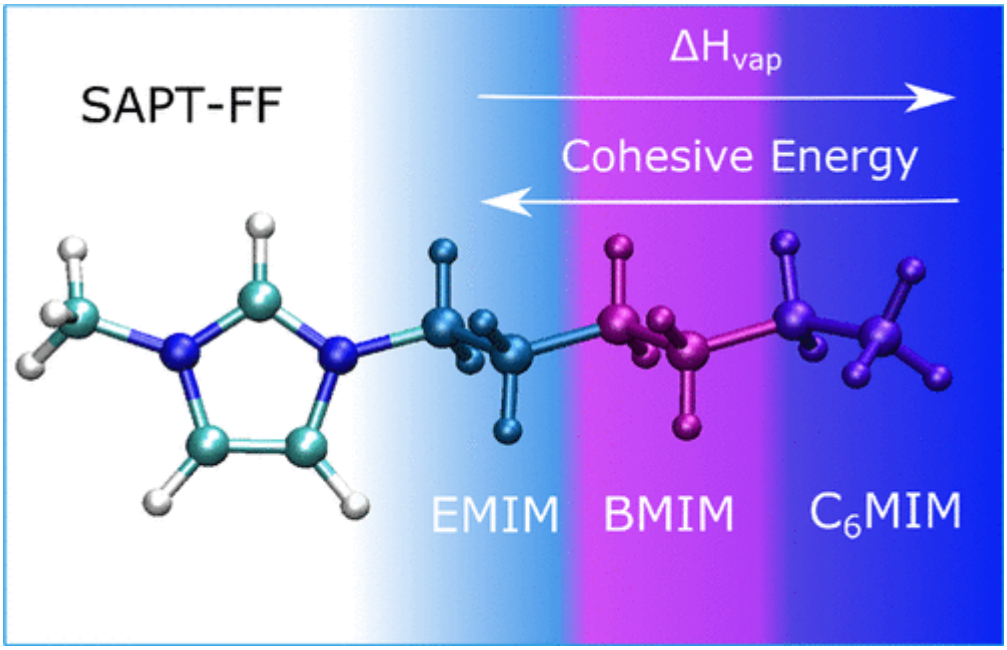
Ab Initio Force Fields for Imidazolium-Based Ionic Liquids – Paper Note

```
> date: 2025-12-11
> paper_title: "Ab Initio Force Fields for Imidazolium-Based Ionic Liquids"
> short_title: "이미다졸리움계 IL SAPT기반 Ab initio Force Field 개발"
> authors: "Jesse G. McDaniel,† Eunsong Choi,‡ Chang Yun Son,† J. R. Schmidt,†
and Arun Yethiraj*,†"
> journal: "The Journal of Physical Chemistry B"
> year: June 28, 2016
> doi: "doi/10.1021/acs.jpcb.6b05328"
> link: "https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpcb.6b05328#_i18"
> priority: "⋆⋆⋆⋆☆"
> key_topics: ["ionic liquid", "force field", "MD"]
> key_methods: ["DFT", "SAPT", "MD"]
> key_systems: ["EMIM+", "[BMIM+]", "[C6MIM+]", "[BF4-]", "[PF6-]"]
```

1. 한 줄 요약 / 키 메시지

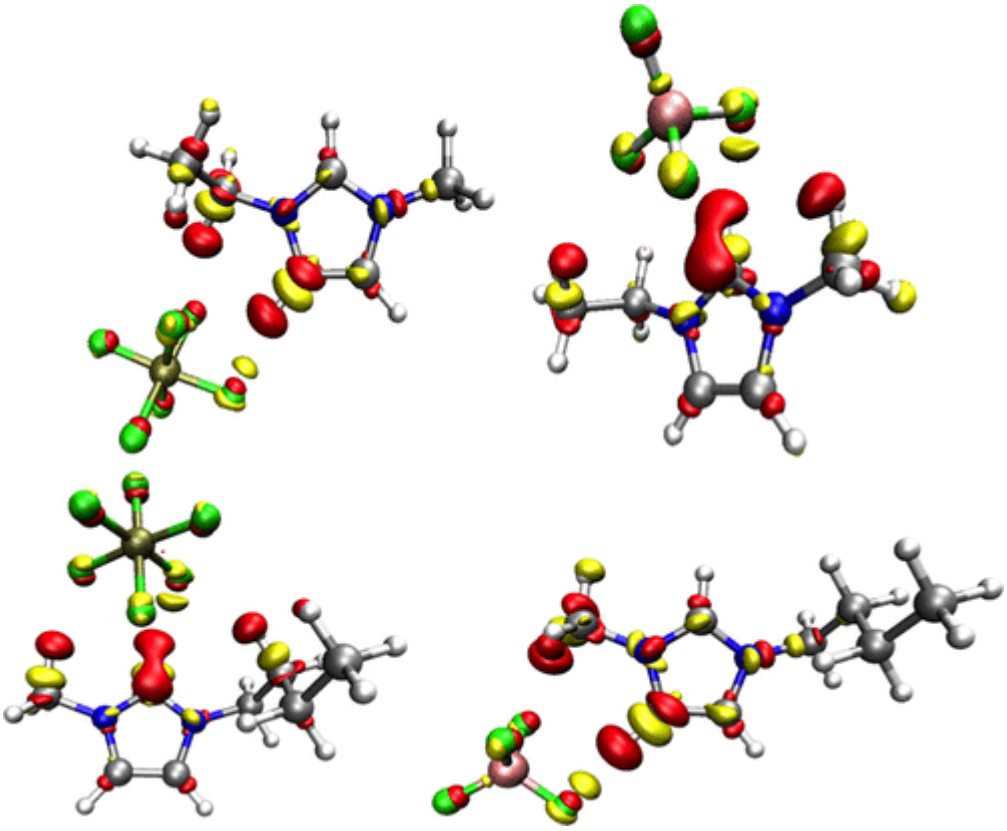
(이 논문이 주장하는 핵심을 한두 문장으로 자유롭게 요약)



2. 자유 메모

```
dsadasda
```

(중요하다고 느낀 것, 방법론, 수식, 그림 설명, 내 해석 등 자유롭게 쓰는 구역)



-
-

---

3. 문단 읽기

- Abstract
    - 알킬 이미다졸리움 계 이온성 액체의 밀도, 기화열, 디퓨전, 전도도에 대한 예측을 하기위한 ab initio Force Field를 개발함.
    - 때때로 일관되지않고, 부족한 실험적인 기화열과 diffusion coeff를 예측하는데 이러한 FF를 유용하게 활용 가능.
    - 이 FF를 통해 이미다졸리움 계 양이온의 알킬 사슬 길이에 따른 cohesive energy의 트렌드를 밝혀냈고, 실험적인 기화열과 다른 트렌드를 가진다는 사실 규명.
    - 상온에서의 IL의 동역학을 예측하는 것은 어려운 것으로 일반적으로 알려져있음. 왜냐면 통계적인 불확실성이 크며, Force field에 대한 세심한 고려가 필요하기 때문임.
- Introduction
    - 상온에서 IL 특성 규명 중요하다
        - IL은 일단 유기 양이온 음이온으로 이루어짐. 다양한 중요한 곳에서 용매나 electrolyte로 사용된다.

        - 다양한 양이온 음이온들이 조합될 수 있으며, 그 조합과 조성에 따라 그 특성을 조절할 수 있다.
        - 그래서 분자레벨에서 IL의 특성을 이해하는 것은 매우 중요하고, 더 나은 추가 응용 디자인을 가능하게 함.
        - 양자화학 계산과 MD를 진행함. 양자화학 계산은 이온 쌍에 대한 전자 구조분석을 위해, 그리고 MD는 벌크 액체에서의 특성 규명을 위해 실시함.
    - 물리적으로 의미있고 정확한 Force Field가 반드시 필요
        - 그래야 ion 분자들의 사이즈, 모양, 유연성, 전하 재분포, polarization, 전하 전이와 같은 구조적 특성으로 밀도, 구조, 응집에너지, 기화열, vapor pressure, 점도, 이온 확산, 전도도 등을 알아낼 수 있기 때문.
    - IL Force Field개발은 현재 진행형
      - 그러나 아직 완전히 모든 IL에 정합성있는 단일 FF는 없음
      - Nonpolarizable Force Field
      - OPLS-AA
      - AMBER
      - Chaban and coworkers[21-23]
      - Maginn and coworkers[4,24-29]
        - Explicitly polarizable atomistic forcefield
          - Borodin and coworkers[30,31]
            - 실험적 기화 엔탈피와 동역학적 특성과 잘 맞는거 확인
          - Wang and coworkers[35-38]
            - 멀티스케일 coarse graining apporach를 활용한 IL FF
          - Yan and coworkers[39-42]
            - polarizable models for EMIM+/NO3-
        - 아주 많은 FF들이 실험값을 통해 parameter들이 정제되었다.
        -

3. 내 연구랑 연결되는 포인트

(내 프로젝트에 어떻게 쓸 수 있을지, 아이디어/적용 가능성 자유롭게 서술)

-

---

4. 나중에 다시 볼 때 체크할 것 (TODO / Questions)

- ☐ 다시 확인할 Figure / Table
- ☐ 구현/재현해보고 싶은 방법
- ☐ 아직 이해 안 되는 부분 / 질문