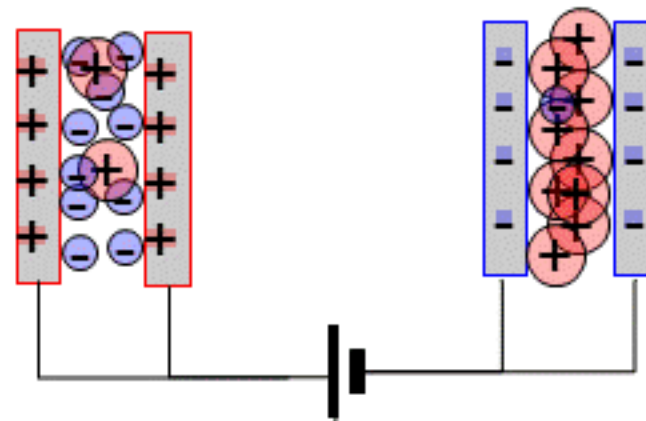


# モンテカルロ法による多孔質電極の研究

(独)産業技術総合研究所 健康工学研究部門 人工細胞研究グループ 清原健司

- 目的** 多孔質電極は、さまざまな電子デバイスに應用されている。しかし、その細孔径がイオン径と同程度まで小さい場合の熱力学的性質は、まだあまりよくわかっていない。そこで我々は、モンテカルロ法を用いて、細孔径が小さい多孔質電極に特異的な性質を分子レベルで明らかにする。
- 内容** 一定電圧・グランドカノニカルアンサンブルによるモンテカルロ法による計算を行い、多孔質電極の種々の熱力学的物理量を計算する。特に、電極の細孔径とイオン径との比の影響について調べる。特に今年度は、電解質が二成分のイオンからなる場合について調べる。
- 結果** 多孔質電極の種々の熱力学的物理量(表面電荷密度、イオン濃度、発生圧力など)が、細孔径、イオン径、印加電圧などの関数として求まった。特に、イオン径が異なる二成分のイオンがある電解質では、電圧や細孔径に応じて二種のイオンが電極に選択的に吸着することなどが明らかになった。



多孔質電極にイオンが充填した様子。