

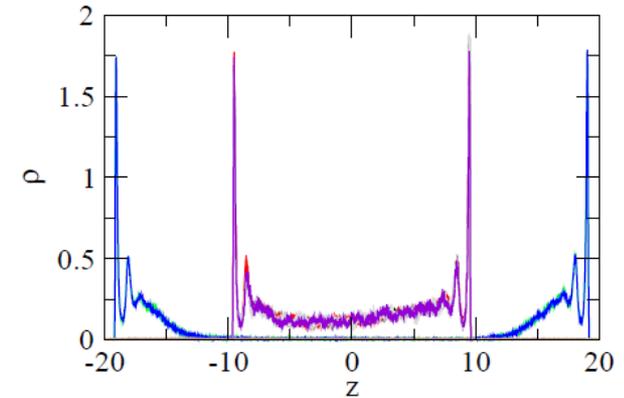
モンテカルロ法による多孔質電極の研究

(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応用されている。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 前年度に引き続き、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した。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た。前年度は電解質イオンのモデルに剛体球に電荷を埋め込んだプリミティブモデルを用いたが、今年度はこれに分子間力を加えたモデルを用いた。

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。イオン間およびイオンと電極の間における分子間力により、多孔質電極中でのイオンの構造はプリミティブモデルの場合とは大きく異なるものとなった。特に、イオンの電極表面への吸着により、細孔径によっては毛細管凝縮が見られた。



多孔質電極の細孔径 W が小さい場合($W=20$)の場合と大きい場合($W=40$)のイオンの密度分布。細孔径が小さい場合は細孔内中央における密度が高い(毛細管凝縮)。

| | |
|---------|-------------|
| 利用した計算機 | PCクラスタシステム |
| CPU時間 | 一計算あたり3日程度 |
| 使用メモリ | 一計算あたり約10GB |
| 並列化 | 8並列 |