

はじめにお読みください

この文章は、研究室に所属する学生が研究活動の一環として作成してくれたものです。研究室セミナーの時間に輪番で発表してもらい、研究に関連した事項の基礎知識の向上をはかりました。内容・文章ともに未だ不完全なものもありますが、2018 年度に調査してくれたものを公開いたします。

※学生の作成してくれたファイルをそのまま公開しております。ところどころ誤った記述もあるため、内容については保証いたしかねます。ご注意ください。
(2019 年度以降、少しずつ改訂していく予定です。)

2018 年 3 月 名古屋工業大学 川崎・石井研究室
<http://kawasaki.web.nitech.ac.jp/jp/tips/index.shtml>

【執筆者一覧】

・ 卒研究生

伊達 怜実、堀之内 理紗、山田 えみり、吉谷 駿、渡邊 裕介

・ M1

浅井 七海、亀岡 真祐子、近藤 航平、長谷川 毅、横井 和真、高橋 実夏子

・ M2

石亀 弘基、久野 潤也、中村 元海、林 遼治、松下 一樹、眞鍋 駿

・ D3

李 蒼昊

【キャパシタ】

2C 11

電気二重層キャパシタの充電時には、電極にどのくらいのイオンが吸着しているのですか？

作成日： 2019 年 2 月 25 日

担当者： 中村 元海

参考文献における、分子動力学シミュレーションによる結果から解答する。電解液はイオン液体の、1-ブチル-3-メチルイミダゾリウムヘキサフルオロリン酸([BMIM][PF₆])である。電極表面はグラファイトのベーサル面(34.4*34 Å²)。電解液領域はグラファイト表面から 50Åまでを想定している。チャージは 0 および ±8.2 μC/cm² となっている。チャージ 0 の状態のマップを Fig.1 に示す。Fig.1 の灰色の点はグラファイトの C 原子、青などの色付きのマッピングは PF₆ アニオン、白黒のマッピングは BMIM を示している。チャージが 0 の状態では、先ほどの条件でアニオンカチオン共に 144 コ存在する。チャージが 8.2 μC/cm² の場合カチオン 144 コ、アニオンが 150 コ、-8.2 μC/cm² の場合カチオン 150 コ、アニオンが 144 コという計算結果になっている。また、チャージの状態では電極近傍におけるイオンの濃度が異なる。そのグラフを Fig.2 に示す。グラフ中の ring はイミダゾリウムの環状構造部を指す。電極が負の電荷を持つ場合、カチオンの電極近傍での濃度が大きくなり、逆に正の電荷を持つ場合はアニオンの濃度が大きくなっていることが分かる。

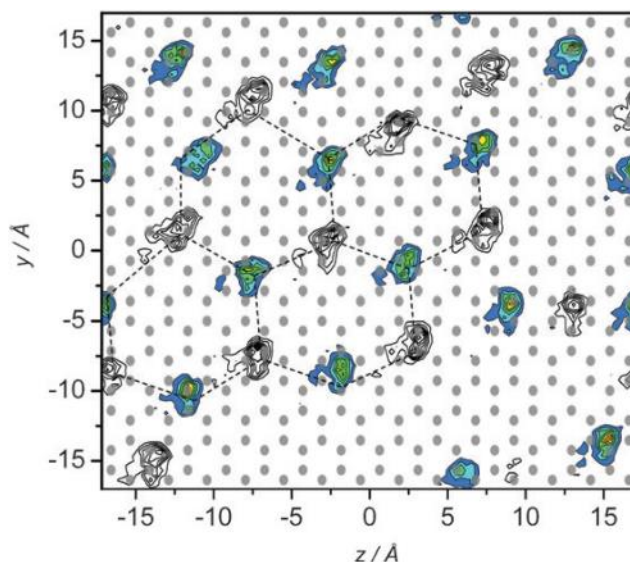


Fig.1 グラファイトベーサル面への吸着イオンの密度等高線図

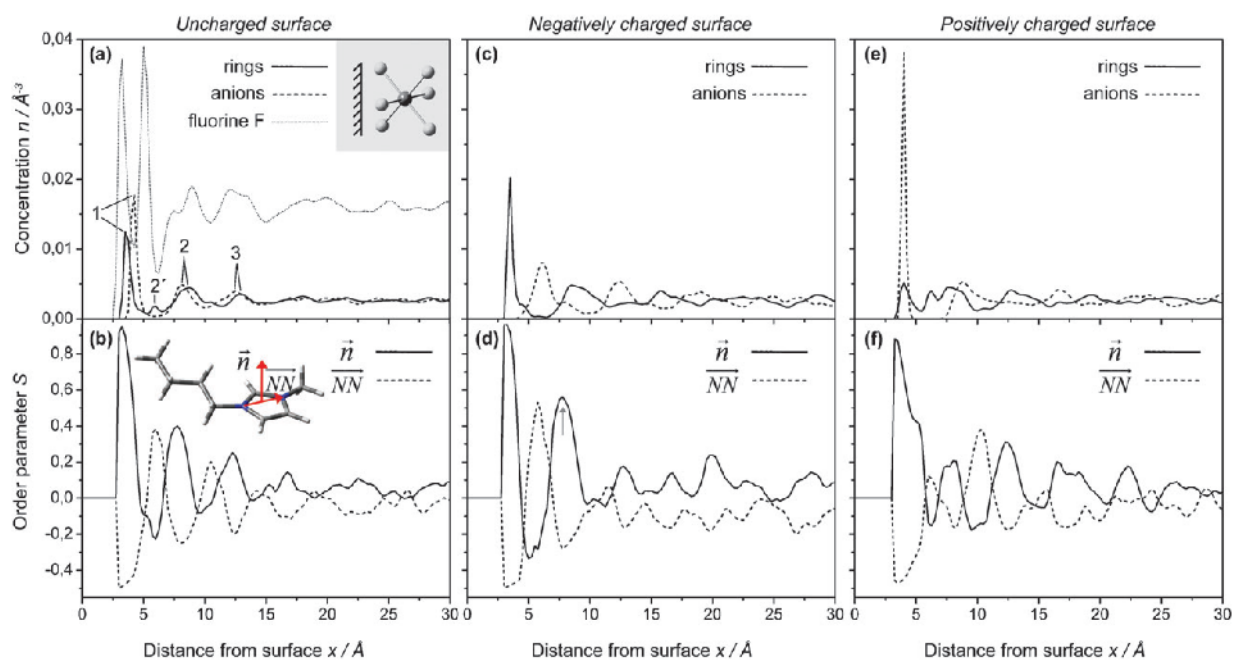


Fig.2 電極近傍における濃度プロファイル
(a)Uncharged(b)Negatively charged(c)Positively charged

参考

Phys. Chem. Chem. Phys., 2009, 11, 5584-5590