

(総研大・分子研) ○谷村あゆみ、Andriy Kovalenko、平田文男

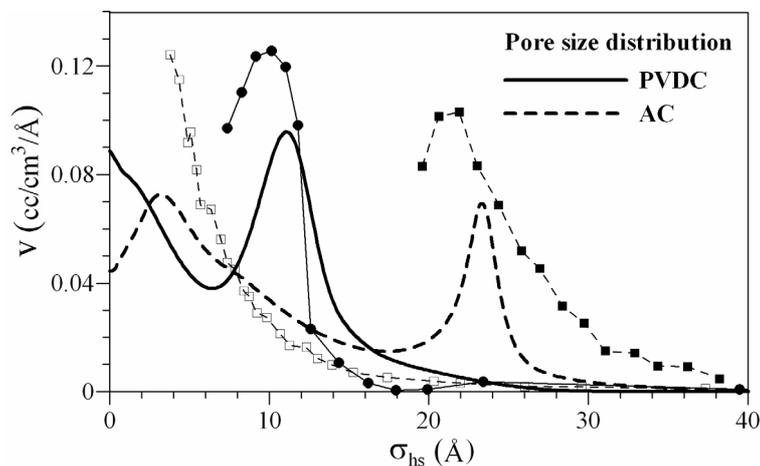
【序】

電気二重層キャパシタは、多孔質炭素電極の細孔に形成される電気二重層に電荷を蓄える装置であり、イオンの物理的吸着を利用して蓄電する。安価で無害なことから、多孔質炭素電極を使った高容量な蓄電デバイスの発展が期待されている。最近、通常の活性炭 (AC) と炭化したポリ塩化ビニリデン (PVDC) の電気二重層容量についての比較実験が行われ、PVDCの方がより高容量であることが示された[1]。

そこで本研究では、Replica RISM 理論を用いて、電解質の種類や電解質濃度、電極の細孔構造と電気二重層容量との関係について調べ、電気二重層キャパシタの容量を大きくするにはどのような組み合わせがよいか、および、その理由について考察した。

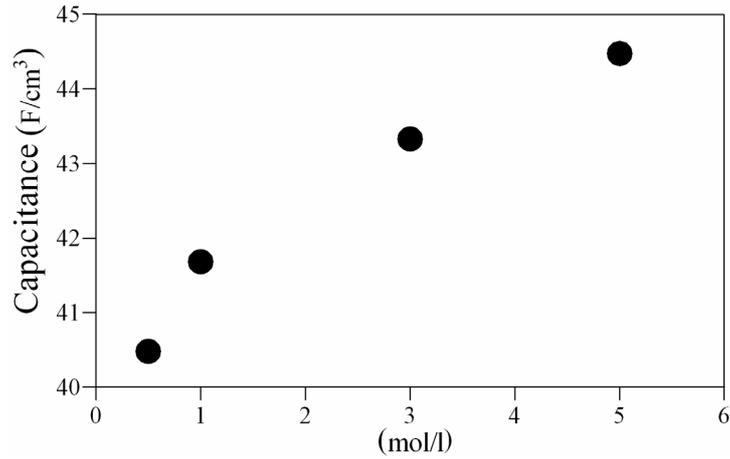
【方法】

多孔質炭素のモデルとして、高分子鎖が絡み合ったゲルを理論的に作り、その空隙を細孔とした。細孔径分布等は、高分子を構成する球の径や球間相互作用を変えて調節した。下のグラフは、そのようにしてモデル化した多孔質炭素の細孔径分布である。細い線は、それぞれの実測値である。AC と PVDC の実際の細孔径分布に模することができた。グラフから分かるように、PVDC は AC に比べて大きい孔が多い。

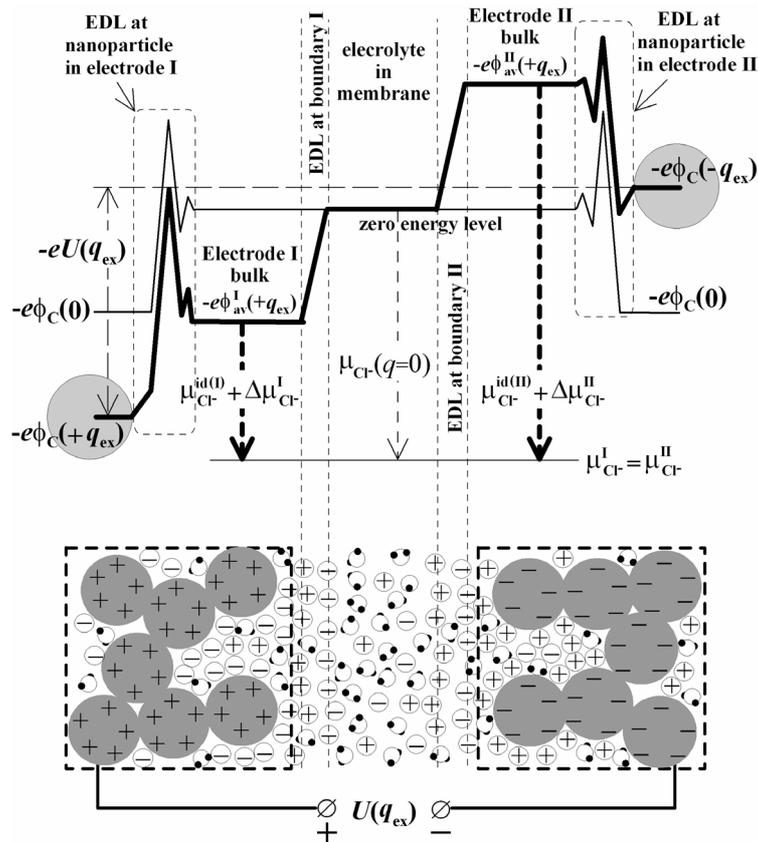


【結果】

電解質溶液に塩化ナトリウム水溶液を用い、様々な濃度での電気二重層容量を計算した。どの濃度でも、PVDC は AC よりも大きな容量となった。AC の小さい孔はイオンが入り込みづらく、二重層が形成されにくいからであると言われている。下のグラフは、PVDC の、塩化ナトリウム溶液濃度と電気二重層容量の関係である。塩化ナトリウム溶液濃度が大きくなるほど電気二重層容量が大きくなった。



これまでの、ヘルムホルツ層の容量が二重層全体の容量を支配しており、二重層容量は電解質濃度にはほとんど無関係であると考えられていた。しかし、我々は、多孔質炭素の二重層容量の決定因子は、主に化学ポテンシャルであると考えた（下図）。電解質の種類や電極の構造を変えた場合については、当日報告する。



[1] T. Takeda, M. Endo, TANSO, **189**, 179 (1999)