

PEOベースの燃料電池の原子論的理解に向けて

ヘルシンキ大学の科学者達は、ポリエチレンオキッド(PEO)燃料電池のプロトンの動きをさらに深く理解するためにBIOVIAの高分子ソフトウェアを使っています。

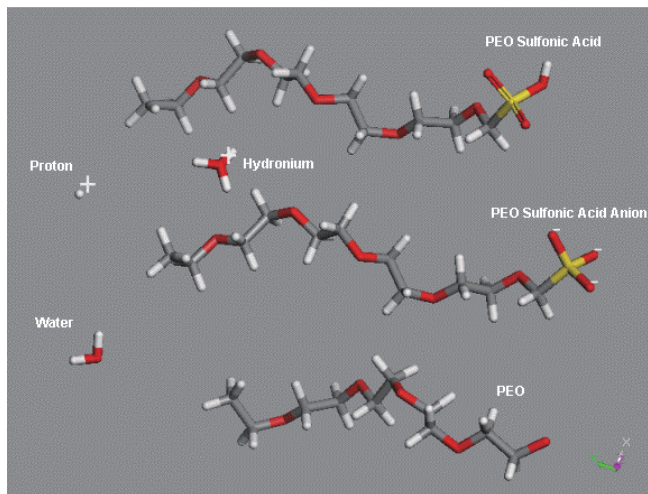


図1 PEOスルホン酸ベース電解質のそれぞれのコンポーネント

現代の燃料電池の多くは、固体酸化物かポリマー電解質のどちらかを持っています。ポリマーベースの太陽電池に関する最も一般的に研究されている電解質はポリエチレンオキッド(PEO)派生物に基づいています。これらの燃料電池システムの効率において重要な制御因子の一つは、電解質を通じたイオンの移動速度です。これは、イオンサイズ、その配位やそれらが系の中で他の化学的成分とどのように相互作用しているかといった、いくらかの異なった原子論的效果によって影響を受けています。

ヘルシンキ大学の研究者達は、BIOVIAのポリマーモデリングツールを使って、PEOとPEOスルホン酸太陽電池中のプロトンの挙動について研究しています。通常、これらの物質中の電解質はプロトン、ヒドロニウムイオン、水、ポリマーおよび酸の陰イオンを含んでいます(図1をご覧ください)。

Ennari博士はBIOVIAのAmorphous Cellモジュールを使って、これらの混合物のいくつかのセルを作りました。このツールは、段状のポリマー鎖構成の組合せを通して、バルクアモルファス系の構造を可能にします。そして、このモデルは、BIOVIAのDiscoverプログラムを用いた最小化と動力学的プロセスによって改良されます。一度、適当なモデルが構成されると(図2をご覧ください)、科学者達は、バルクポリマーの自由体積、イオンの配位や拡散係数を含んだ特性の範囲を計算することができます。後者の2つの特性は、燃料電池の特性に対して重要な役割を果たすことができます。

陽イオンと陰イオンの配位に関する解析によって、陽イオンが水に対して強く配位しており、陰イオンに対して弱く配位していることが明らかになりました。系の中の水の配位が弱くなったとき、陽イオンは陰イオンと大きな配位を示すようになります。実験的な研究から、弱い水の配位系は低伝導率を有することが知られており、陽イオン陰イオン配位の減少と陽イオン水配位の増大が電解質の特性を改善するために重要な要因であることを示唆しています。加えて、科学者達はDiscoverの分子動力学を使って、系の中のそれぞれの構成物の拡散係数を算出することもできました。

拡散係数はイオン導電性に対して直接的な相関を持っています。表1はイオンの拡散係数を示しています。これによれば、プロトンが、系の中で最も移動し易いイオンであり、従

Organization

University of Helsinki

Products

BIOVIA Materials Studio Amorphous Cell
BIOVIA Materials Studio Discover

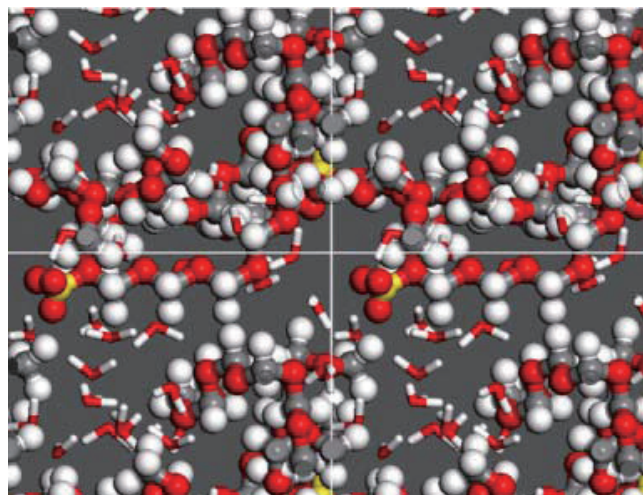


図2 PEOスルホン酸ベース電解質の非晶質セルの例。

って、それらの挙動は電解質の性能に大きな影響を与えることになるでしょう。拡散係数はイオン導電性に直接相関を持っている。テーブル1はイオン類の拡散係数を示す。プロトンがシステムの中の最も多くの移動イオンであると考えてことができ、したがって、それらの振舞いは電解質の性能に最も大きい影響を持つことになります。

コンポーネント	拡散係数($10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$)
H+	12
H3O	1.9
酸陰イオン	0.6
H2O	2.13

Ennari博士は、「分子モデリングは、理論的あるいは実験的に到達することのできない理解に到達するための有効なツールであることが示されました。将来、新物質のデザインにおいてシミュレーションの役割は増してゆくでしょう。」とコメントしています。

1. J. Ennari - Ph.D Thesis, University of Helsinki, 2000, ISBN 951-45-9140-2. Copies available online at <http://ethesis.helsinki.fi/julkaisut/mat/kemia/vk/ennari>
2. J. Ennari, J. Hamara, and F. Sundholm, Vibrational spectra as experimental probes for models of ion conducting polyether systems *Polymer*, 1997, 38, 3733.
3. J. Ennari, M. Elomaa, and F. Sundholm, Modeling a polyelectrolyte system in water to estimate the ion-conductivity *Polymer*, 1999, 40, 5035.
4. J. Ennari, I. Neelov, and F. Sundholm, Molecular dynamics simulation of the PEO sulfonic acid in water, *Computational and Theoretical Polymer Science*, 2000, 10, 403.
5. J. Ennari, M. Elomaa, I. Neelov, and F. Sundholm, Modeling of water-free and water containing solid polyelectrolytes, *Polymer*, 2000, 41, 985.
6. J. Ennari, I. Neelov, and F. Sundholm, Molecular dynamics simulation of the structure of PEO based solid polyelectrolytes, *Polymer*, 2000, 41, 4057.