

Streszczenie

Zbadano wpływ wielkości cząsteczek rozpuszczalnika na właściwości strukturalne i termodynamiczne granicy faz elektroda/elektrolit z SPM metodą GCMC i porównano tak otrzymane wyniki z uzyskanymi z teorii MPB. Symulacja GCMC wymaga znajomości współczynników aktywności. Do ich obliczenia zastosowano odwróconą technikę IGCMC. W celu interpretacji wyników otrzymanych dla elektrolitu z SPM badania rozpoczęto od analizy dwuskładnikowej mieszaniny sztywnych kul. Następnie badano model elektrolitu z SPM o równych i różnych średnicach jonów i cząsteczek rozpuszczalnika. Stwierdzono, że mniejsze kule w mieszaninie z większymi mają niższą wartość współczynnika aktywności. Do opisu współczynników aktywności elektrolitów rzeczywistych założono, że aniony i cząsteczki rozpuszczalnika mają różne średnice. W badaniach tych uwzględniono hydratację jonów i asocjację cząsteczek rozpuszczalnika. Otrzymano bardzo dobrą zgodność wyników symulacji IGCMC z eksperymentem. Potwierdzono również słuszność teorii Marcusa mówiącej, że rodzaj soli ma wpływ na wielkość asocjatu wody. Następnie badano wpływ wielkości cząsteczek rozpuszczalnika na właściwości strukturalne i termodynamiczne granicy faz elektroda/elektrolit z SPM za pomocą symulacji GCMC i teorii MPB. Stwierdzono, że mniejsza średnica cząsteczek rozpuszczalnika sprzyja przyleganiu anionów do powierzchni dodatnio naładowanej elektrody.