

モンテカルロ法による多孔質電極の研究

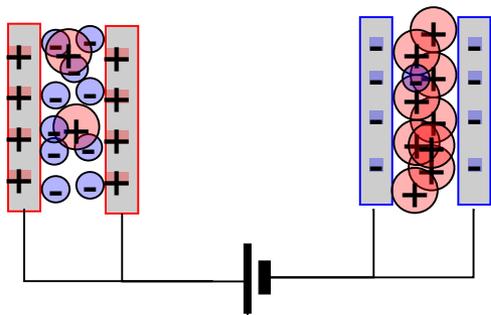
(独)産業技術総合研究所 健康工学研究部門 人工細胞研究グループ 清原健司

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。

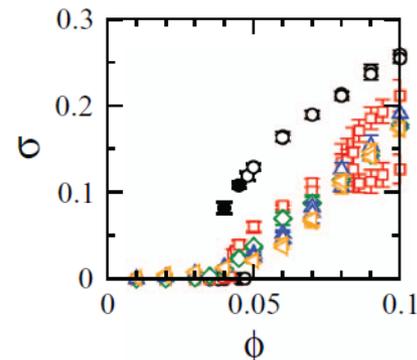
内容 一定電圧・グランドカノニカルアンサンブルによるモンテカルロ法による計算を行い、多孔質電極の種々の熱力学的物理量を計算する。特に、電極の細孔径とイオン径との比の影響について調べる。

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。特に、正負イオンでイオン径が異なる場合には、正負極における熱力学的振る舞いも非対称になることなどが明らかになった。

その他 計算機はクラスタシステムを利用した。4コア(1ノード)利用したときは並列化率が高かったが、8コア(2ノード)を利用するとこれが大きく下がった。



多孔質電極にイオンが充填した様子。



電圧(Φ)と表面電荷密度(σ)の関係。細孔径がイオン径の1.1倍、1.5倍、2.0倍、4.0倍、8.0倍の場合がそれぞれ黒、赤、緑、青、橙で示されている。J. Chem. Phys., Vol. 136, 094701 (2012)より。(Copyright American Institute of Physics)