

電極へのイオンおよび分子の吸着のメカニズム

産業技術総合研究所無機機能材料研究部門 清原健司

目的 炭素電極へのイオンおよびアミノ酸の電気化学的吸着における、熱力学的および電気化学的応答について、分子動力学シミュレーションを用いて調べる。

内容 イオンおよびアミノ酸の吸着に伴う、電極表面電荷密度の変化や脱溶媒和の自由エネルギーを計算した。

結果 イオンおよびアミノ酸の種類によって、炭素電極への吸着時の電極表面電荷密度や脱溶媒和の自由エネルギーが大きく異なることがわかった。

利用した計算機

ノード時間

使用メモリ

並列化

VCC

21000時間

30GB

20並列

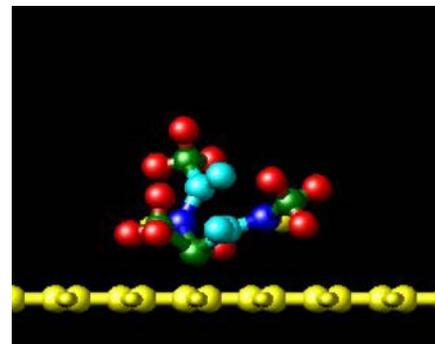


図 炭素電極に吸着したアミノ酸