

UNIVERSIDAD NACIONAL DE INGENIERIA
FACULTAD DE CIENCIAS



TESIS

**“SIMULACION DE UN SUPERCAPACITOR POROSO POR MEDIO DEL
ALGORITMO MONTECARLO METROPOLI”**

PARA OBTENER EL GRADO ACADÉMICO DE MAESTRO EN CIENCIAS EN FÍSICA

ELABORADO POR:

GIANCARLO MANUEL QUISPE TALLEDO

ASESOR:

Dr. HECTOR RAUL LORO RAMIREZ

LIMA-PERÚ

2018

Dedico este trabajo a mis padres por su apoyo durante muchos años.

Agradecimientos

Agradezco al CONCYTEC por el programa de Maestría en Física, convenio Nro. 167 FONDECYT-UNI, por la apertura de los cursos de maestría y la posibilidad de desarrollar un Tema de Investigación afin al programa, al Dr. Hector Loro por su asesoramiento para este trabajo y a todos los docentes por haberme aportado conocimientos .

Resumen

El almacenamiento de cada vez mayores cantidades de energía en dispositivos cada vez más pequeños es una de las necesidades más importantes en nuestra sociedad moderna.

Durante muchos años se han usado baterías para satisfacer esta necesidad, y se ha ido desarrollando una gran variedad de estos dispositivos que han permitido el almacenamiento de cada vez mayores cantidades de energía.

Pero en los últimos años, nuevas investigaciones han orientado el interés de varios científicos hacia el estudio de los dispositivos conocidos como supercapacitores, que a diferencia de los capacitores convencionales son capaces de almacenar una considerable cantidad de energía y proporcionar altos valores de capacitancia.

En este trabajo se hace uso de un modelo de simulación por computadora para emular el comportamiento de un sistema de partículas eléctricas al interior de un nanoporo en presencia de cargas eléctricas en ambos extremos del mismo, teniendo en cuenta las condiciones de temperatura y la aleatoriedad del movimiento de las partículas.

Abstract

The storage of increasing amounts of energy in increasingly smaller devices is one of the most important needs in our modern society.

Batteries have been used for many years to satisfy this need, and a great variety of these devices have been developed that have allowed the storage of ever greater quantities of energy.

But in recent years, new research has oriented the interest of several scientists towards the study of devices known as supercapacitors, which unlike conventional capacitors, are capable of storing a considerable amount of energy and providing high valuee of capacitance.

In this work a computer simulation model is used to emulate the behavior of a system of electrical particles inside a nanotube in the presence of electric charges at both ends of it, taking into account the temperature conditions and the randomness of the movement of the particles.

Índice

I	Introducción	1
II	Fundamento Teórico	3
1.	Capacitor	3
2.	Supercapacitores Porosos	4
3.	Algoritmo Montecarlo-Metrópoli	8
4.	Simulación de un Supercapacitor Poroso	9
5.	Datos Experimentales	11
III	Técnicas de Cálculo	11
6.	Cálculo de la Energía de un Estado	12
7.	Modelos de Simulación	14
8.	Pasos del Modelo de Simulación	16
IV	Resultados Obtenidos	18
9.	Aplicación del Modelo a las Condiciones del Experimento	19
10.	Comparación con el metodo de Dinamica Molecular	20
11.	Comparación entre la programación de esta tesis y la de un trabajo previo	22
12.	Simulación de un Nanoporo para la Estimación del Potencial Eléctrico y la Capacitancia	24
12.1.	Simulación con el Primer Modelo	24
12.1.1.	Nanoporo con un diámetro igual al diámetro de los iones	30
12.1.2.	Nanoporo con un diámetro igual al doble del diámetro de los iones	35
12.1.3.	Nanoporo con un diámetro igual al triple del diámetro de los iones	40

12.2. Simulación con el Segundo Modelo	45
12.2.1. Nanoporo con un diametro igual al diametro de los iones	50
12.2.2. Nanoporo con un diámetro igual al doble del diámetro de los iones	55
12.2.3. Nanoporo con un diámetro igual al triple del diámetro de los iones	59
V Conclusiones	64
VI Anexos	65
VII Bibliografía	81

Indice de Tablas

Tabla 1: permitividad eléctrica relativa de algunos líquidos iónicos	5
Tabla 2: Para el primer modelo, promedio de carga eléctrica adimensional para cargas impuestas con valores entre 0.00 y 1.00. Con permitividad eléctrica relativa de 80	66
Tabla 3: Para el primer modelo, promedio de carga eléctrica adimensional para cargas impuestas con valores entre 1.25 y 2.25. Con permitividad eléctrica relativa de 80	67
Tabla 4: Para el primer modelo, promedio de carga eléctrica adimensional para cargas impuestas con valores entre 2.50 y 3.50. Con permitividad eléctrica relativa de 80	68
Tabla 5: Para el primer modelo, promedio de carga eléctrica adimensional para cargas impuestas con valores entre 3.75 y 5.00. Con permitividad eléctrica relativa de 80	69
Tabla 6: Para el primer modelo, promedio de carga eléctrica adimensional para cargas impuestas con valores entre 0.25 y 0.875. Con permitividad eléctrica relativa de 16	70
Tabla 7: Para el primer modelo, promedio de carga eléctrica adimensional para cargas impuestas con valores entre 1.00 y 1.75. Con permitividad eléctrica relativa de 16	71
Tabla 8: Para el primer modelo, promedio de carga eléctrica adimensional para cargas impuestas con valores entre 2.00 y 2.625. Con permitividad eléctrica relativa de 16	72
Tabla 9: Para el primer modelo, promedio de carga eléctrica adimensional para cargas impuestas con valores entre 2.75 y 3.50. Con permitividad eléctrica relativa de 16	73
Tabla 10: Para el primer modelo, promedio de carga eléctrica adimensional para cargas impuestas con valores entre 3.75 y 4.25. Con permitividad eléctrica relativa de 16	74
Tabla 11: Para el primer modelo, promedio de carga eléctrica adimensional para cargas impuestas con valores entre 4.50 y 5.00. Con permitividad eléctrica relativa de 16	75
Tabla 12: Para el segundo modelo, promedio de carga eléctrica adimensional para cargas impuestas con valores entre 0.01 y 0.50. Con permitividad eléctrica relativa de 55	76

Indice de Figuras

Figura 1: representación de las partes básicas de un capacitor	3
Figura 2: dependencia entre la capacitancia y el diámetro del nanoporo	6
Figura 3: representación de las partículas del líquido iónico en el nanoporo	7
Figura 4: representación de matriz de nanoporos	9
Figura 5: representación del modelo de simulación	10
Figura 6: datos experimentales entre la capacitancia y el diámetro de los nanoporos	11
Figura 7: representación de los dos modelos de simulación utilizados	14
Figura 8: comparación entre los valores experimentales y los valores simulados	19
Figura 9: comparación entre los valores experimentales y los valores simulados por el método de Dinámica Molecular Clásica	20
Figura 10: comparación entre los valores experimentales, los valores simulados por los métodos de Dinámica Molecular Clásica y Montecarlo Metropoli	21
Figura 11: carga eléctrica adimensional promedio a lo largo del nanoporo, bibliografía [2]	22
Figura 12: carga eléctrica adimensional promedio a lo largo del nanoporo, según la simulación para esta tesis	23
Figura 13: relación entre el potencial eléctrico adimensional y la longitud del nanoporo tubular para el primer modelo	24
Figura 14: carga eléctrica adimensional promedio a lo largo del nanoporo para una carga impuesta de 0, para el primer modelo	26
Figura 15: carga eléctrica adimensional promedio a lo largo del nanoporo para una carga impuesta de 1, para el primer modelo	27
Figura 16: carga eléctrica adimensional promedio a lo largo del nanoporo para una carga impuesta de 2, para el primer modelo	28
Figura 17: carga eléctrica adimensional promedio a lo largo del nanoporo para una carga impuesta de 3, para el primer modelo	29
Figura 18: carga eléctrica adimensional promedio a lo largo del nanoporo para una carga impuesta de 4, para el primer modelo	30
Figura 19: relación entre la carga impuesta, potencial eléctrico y capacitancia adimensionales, para un nanoporo de diámetro igual al diámetro de los iones y una permitividad eléctrica relativa de 80, en el primer modelo	31
Figura 20: relación entre la carga impuesta, potencial eléctrico y capacitancia, para un nanoporo de diámetro igual al diámetro de los iones y una permitividad eléctrica relativa de 80, para el primer modelo	32

Figura 21: relación entre la carga impuesta, potencial eléctrico y capacitancia adimensionales, para un nanoporo de diámetro igual al diámetro de los iones y una permitividad eléctrica relativa de 16, en el primer modelo	33
Figura 22: relación entre la carga impuesta, potencial eléctrico y capacitancia, para un nanoporo de diámetro igual al diámetro de los iones y una permitividad eléctrica relativa de 16, para el primer modelo	34
Figura 23: relación entre la carga impuesta, potencial eléctrico y capacitancia adimensionales, para un nanoporo de diámetro igual al doble del diámetro de los iones y una permitividad eléctrica relativa de 80, en el primer modelo	36
Figura 24: relación entre la carga impuesta, potencial eléctrico y capacitancia, para un nanoporo de diámetro igual al doble del diámetro de los iones y una permitividad eléctrica relativa de 80, en el primer modelo	37
Figura 25: relación entre la carga impuesta, potencial eléctrico y capacitancia adimensionales, para un nanoporo de diámetro igual al doble del diámetro de los iones y una permitividad eléctrica relativa de 16, en el primer modelo	38
Figura 26: relación entre la carga impuesta, potencial eléctrico y capacitancia, para un nanoporo de diámetro igual al doble del diámetro de los iones y una permitividad eléctrica relativa de 16, en el primer modelo	39
Figura 27: relación entre la carga impuesta, potencial eléctrico y capacitancia adimensionales, para un nanoporo de diámetro igual al triple del diámetro de los iones y una permitividad eléctrica relativa de 80, en el primer modelo	40
Figura 28: relación entre la carga impuesta, potencial eléctrico y capacitancia, para un nanoporo de diámetro igual al triple del diámetro de los iones y una permitividad eléctrica relativa de 80, en el primer modelo	41
Figura 29: relación entre la carga impuesta, potencial eléctrico y capacitancia adimensionales, para un nanoporo de diámetro igual al triple del diámetro de los iones y una permitividad eléctrica relativa de 16, en el primer modelo	42
Figura 30: relación entre la carga impuesta, potencial eléctrico y capacitancia, para un nanoporo de diámetro igual al triple del diámetro de los iones y una permitividad eléctrica relativa de 16, en el primer modelo	43
Figura 31: Comparación entre los potenciales eléctricos para distintos diámetros de nanoporo, para el primer modelo.	44
Figura 32: Comparación entre los potenciales eléctricos para distintos diámetros de nanoporo, para el segundo modelo.	45

Figura 33: relación entre el potencial eléctrico adimensional y la longitud del nanoporo tubular para el segundo modelo	45
Figura 34: carga eléctrica adimensional promedio a lo largo del nanoporo para una carga impuesta de 0, para el segundo modelo	46
Figura 35: carga eléctrica adimensional promedio a lo largo del nanoporo para una carga impuesta de 0.01, para el segundo modelo	47
Figura 36: carga eléctrica adimensional promedio a lo largo del nanoporo para una carga impuesta de 0.05, para el segundo modelo	48
Figura 37: carga eléctrica adimensional promedio a lo largo del nanoporo para una carga impuesta de 0.20, para el segundo modelo	49
Figura 38: carga eléctrica adimensional promedio a lo largo del nanoporo para una carga impuesta de 0.30, para el segundo modelo	50
Figura 39: relación entre la carga impuesta, potencial eléctrico y capacitancia adimensionales, para un nanoporo de diámetro igual al diámetro de los iones y una permitividad eléctrica relativa de 55, en el segundo modelo	51
Figura 40: relación entre la carga impuesta, potencial eléctrico y capacitancia, para un nanoporo de diámetro igual al diámetro de los iones y una permitividad eléctrica relativa de 55, en el segundo modelo	52
Figura 41: relación entre la carga impuesta, potencial eléctrico y capacitancia adimensionales, para un nanoporo de diámetro igual al diámetro de los iones y una permitividad eléctrica relativa de 16, en el segundo modelo	53
Figura 42: relación entre la carga impuesta, potencial eléctrico y capacitancia, para un nanoporo de diámetro igual al diámetro de los iones y una permitividad eléctrica relativa de 16, en el segundo modelo	54
Figura 43: relación entre la carga impuesta, potencial eléctrico y capacitancia adimensionales, para un nanoporo de diámetro igual al doble del diámetro de los iones y una permitividad eléctrica relativa de 55, en el segundo modelo	55
Figura 44: relación entre la carga impuesta, potencial eléctrico y capacitancia, para un nanoporo de diámetro igual al doble del diámetro de los iones y una permitividad eléctrica relativa de 55, en el segundo modelo	56
Figura 45: relación entre la carga impuesta, potencial eléctrico y capacitancia adimensionales, para un nanoporo de diámetro igual al doble del diámetro de los iones y una permitividad eléctrica relativa de 16, en el segundo modelo	57
Figura 46: relación entre la carga impuesta, potencial eléctrico y capacitancia, para un nanoporo	

de diámetro igual al doble del diámetro de los iones y una permitividad eléctrica relativa de 16, en el segundo modelo	58
Figura 47: relación entre la carga impuesta, potencial eléctrico y capacitancia adimensionales, para un nanoporo de diámetro igual al triple del diámetro de los iones y una permitividad eléctrica relativa de 55, en el segundo modelo	59
Figura 48: relación entre la carga impuesta, potencial eléctrico y capacitancia, para un nanoporo de diámetro igual al triple del diámetro de los iones y una permitividad eléctrica relativa de 55, en el segundo modelo	60
Figura 49: relación entre la carga impuesta, potencial eléctrico y capacitancia adimensionales, para un nanoporo de diámetro igual al triple del diámetro de los iones y una permitividad eléctrica relativa de 16, en el segundo modelo	61
Figura 50: relación entre la carga impuesta, potencial eléctrico y capacitancia, para un nanoporo de diámetro igual al triple del diámetro de los iones y una permitividad eléctrica relativa de 16, en el segundo modelo	62
Figura 51: Comparación entre los potenciales eléctricos para distintos diámetros de nanoporo, para el segundo modelo.	63
Figura 52: Comparación entre los potenciales eléctricos para distintos diámetros de nanoporo, para el segundo modelo.	63
Figura 53: relación entre la carga impuesta, potencial eléctrico y capacitancia, para una temperatura de $300K$	77
Figura 54: relación entre la carga impuesta, potencial eléctrico y capacitancia, para una temperatura de $100K$	78
Figura 55: picos de capacitancia adimensional	79
Figura 56: Densidad electrica adimensional promedio para cargas impuestas adimensionales de 0.5 y 0.75	79
Figura 57: Densidad electrica adimensional promedio para cargas impuestas adimensionales de 1.25 y 1.75	80
Figura 58: Densidad electrica adimensional promedio para cargas impuestas adimensionales de 2.75 y 2.875	81

Parte I

Introducción

En años recientes se han reportado [5,6] dispositivos que pueden almacenar grandes cantidades de energía eléctrica en espacios relativamente pequeños, es decir que se han reportado capacitores con valores de capacitancia muy altos. Estos supercapacitores tienen una matriz porosa [15,16], cuyos poros tienen dimensiones nanométricas, además la forma que suelen tener los nanoporos es una forma tubular alargada.

A final de los ochentas se desarrolló el primer supercapacitor de un faradio, y compañías rusas a principios de los noventa presentaron el primer supercapacitor que superaba los 100 faradios. Estos dispositivos generaron un gran interés debido a su aplicación a automóviles híbridos, por lo que se impulsó su investigación en todo el mundo, además de su uso en sistemas de energía solar y energía eólica. Estos supercapacitores comerciales están constituidos por una matriz porosa (frecuentemente hecha de carbono), y una sustancia líquida que funciona como electrolito. Actualmente se usan en sistemas de potencia para la estabilización de voltaje, por lo que encontramos supercapacitores de 1500 y 3000 faradios. Asimismo, dadas las dimensiones de estos sistemas, es posible simular el desplazamiento de los iones a través de matrices porosas tubulares considerando una cadena tubular con el fin de estimar la capacitancia de estos sistemas [17]. Trabajos recientes [2] muestran resultados satisfactorios al realizar estas simulaciones. En este trabajo se busca reproducir estos resultados usando rutinas de cálculo propias así como evaluar nanoporos tubulares de distintos tamaños a los ya reportados y estudiar su comportamiento para diferentes casos. Este trabajo ayudará también, más adelante, obtener simulaciones de sistemas más complejos.

En el presente trabajo se hace uso del algoritmo Montecarlo Metrópoli para elaborar un modelo en computadora con el fin de simular supercapacitores y estudiar su comportamiento bajo distintos parámetros, en los que se incluyen la temperatura, la permitividad eléctrica relativa, la carga en el supercapacitor, etc. Además se muestran los resultados de un experimento en laboratorio, para luego compararlos con los resultados obtenidos con el modelo de simulación. La programación desarrollada para este trabajo se podrá usar en trabajos posteriores para estimar la energía que podrá almacenar un supercapacitor para ciertos parámetros de diseño y a una determinada temperatura.

Parte II

Fundamento Teórico

1. Capacitor

Dispositivo que consiste en dos conductores cargados eléctricamente, separados por una distancia relativamente pequeña. La interacción entre las cargas eléctricas en cada conductor genera una diferencia de potencial eléctrica en el espacio entre ambos conductores cargados, y la razón entre la carga eléctrica almacenada en cada conductor y el potencial eléctrico entre ellos es conocido con el nombre de capacitancia (cuya unidad es el Faradio), cuyo valor depende de distintos factores como la forma de los conductores, la distancia entre los conductores, la carga eléctrica en los conductores, el material presente entre los conductores, etc.

Son ampliamente usados en la industria eléctrica para prevenir daños por aumentos repentinos de corriente eléctrica .

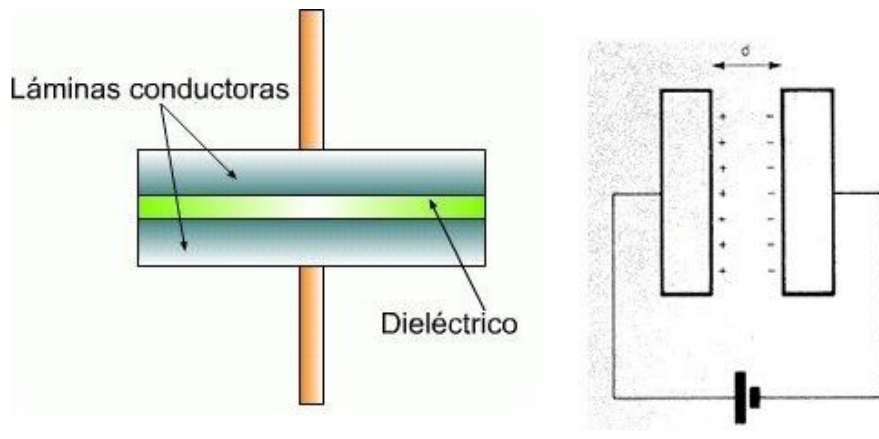


Figura 1: En esta figura se muestran las partes fundamentales que componen un capacitor convencional.

En la figura 1 se muestra un esquema simple de las partes básicas de un capacitor. A partir de este esquema se pueden construir sistemas muy complejos que son capaces de suministrar valores de capacitancia considerablemente grandes.

2. Supercapacitores Porosos

En la actualidad, los dispositivos conocidos como supercapacitores son utilizados para almacenar considerables cantidades de energía en comparación a las baterías usadas en el pasado siglo, además no hacen uso de reacciones químicas en el proceso de carga o descarga de los mismos, lo que eleva considerablemente su vida útil. Consisten en el uso de matrices de algún material poroso (como el carbono) cuyos espacios vacíos tienen escalas nanométricas [1,12], cuyo interior está lleno de una sustancia que sirve como electrolito, que es conocido con el nombre de líquido iónico [2,8]. Las interacciones entre las cargas eléctricas que ubicamos en la matriz y las cargas del líquido iónico son capaces de generar un potencial eléctrico considerablemente grande, que nos permite a su vez almacenar grandes cantidades de energía en comparación a las baterías convencionales.

Un líquido iónico es un fluido constituido exclusivamente por iones que son lo suficientemente voluminosos como para que las interacciones entre ellos (de naturaleza electrostática) sea tan débiles que la sustancia se mantenga en estado líquido a temperatura ambiente, y tienen también una gran estabilidad electroquímica lo que hace que permanezcan estables aún bajo la presencia de altos potenciales eléctricos, además de poseer una conductividad eléctrica generalmente muy baja a temperatura ambiente comparado con electrolitos acuosos convencionales como el *KOH* acuoso [20]. Estos líquidos iónicos no necesitan de un disolvente para permanecer en estado líquido, por lo que su concentración es máxima. Esta alta concentración de iones son ideales para la construcción de los supercapacitores. Además, la viscosidad del líquido iónico debe ser baja, debido a que debe introducirse por los pequeños nanoporos de la matriz porosa.

Los líquidos iónicos son un tipo de sustancia con una gran variedad [8,15], algunos de ellos se muestran en la siguiente tabla incluyendo la permitividad eléctrica relativa correspondiente a cada uno.

1- <i>H</i> -3-methylimidazolium chloride	13.8 ± 1.0
1- <i>H</i> -3-methylimidazolium bromide	16.6 ± 1.2
1,3-dimethylimidazolium dimethylphosphate	29.6 ± 1.5
1-ethyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide	12.0 ± 0.4
1-ethyl-3-methylimidazolium trifluoromethanesulfonate	16.5 ± 0.5
1-ethyl-3-methylimidazolium diethylphosphate	16.9 ± 0.8
1-ethyl-3-methylimidazolium hydrogensulfate	18.4 ± 0.8
1-ethyl-3-methylimidazolium butylsulfate	30.0 ± 1.5
1-ethyl-3-methylimidazolium ethylsulfate	35.0 ± 1.5
1-propyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide	13.3 ± 0.4
1-butyl-3-methylimidazolium trifluoromethanesulfonate	12.9 ± 0.5
1-butyl-3-methylimidazolium thiocyanate	13.7 ± 0.8
1-butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate	13.9 ± 0.4
1-butyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate	14.0 ± 0.7
1-butyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide	14.0 ± 0.5
1-pentyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide	15.0 ± 0.5
1-ethyl-2,3-dimethylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide	12.8 ± 0.4
1-butyl-2,3-dimethylimidazolium hexafluorophosphate	9.4 ± 1.0
1-butyl-2,3-dimethylimidazolium tetrafluoroborate	13.3 ± 0.6
1-butyl-2,3-dimethylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide	14.0 ± 0.8
1-butyl-2,3,4,5-tetramethylimidazolium tetrafluoroborate	12.0 ± 0.6
1-butyl-2,3,4,4-tetramethylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide	15.0 ± 0.8

Tabla 1: En esta tabla se muestra el valor de la permitividad eléctrica relativa de algunos líquidos iónicos [8]. Podemos ver un rango de valores considerablemente amplio.

En la tabla 1 se muestran los valores de permitividades eléctricas a temperatura ambiente para distintos líquidos iónicos, y se evidencia un rango de valores considerablemente grande, lo que es útil dependiendo del uso que se le deseen dar.

Los altos valores de capacitancia y potencial eléctrico que pueden alcanzar estos capacitores los convierten en dispositivos importantes para la industria. A través de varios experimentos [4,9] se ha demostrado que el tamaño de los nanoporos es un factor importante que determina la capacitancia del supercapacitor.

La siguiente gráfica muestra los resultados de varios experimentos que relacionan el tamaño de los nanoporos tubulares de la matriz con el valor de la capacitancia.

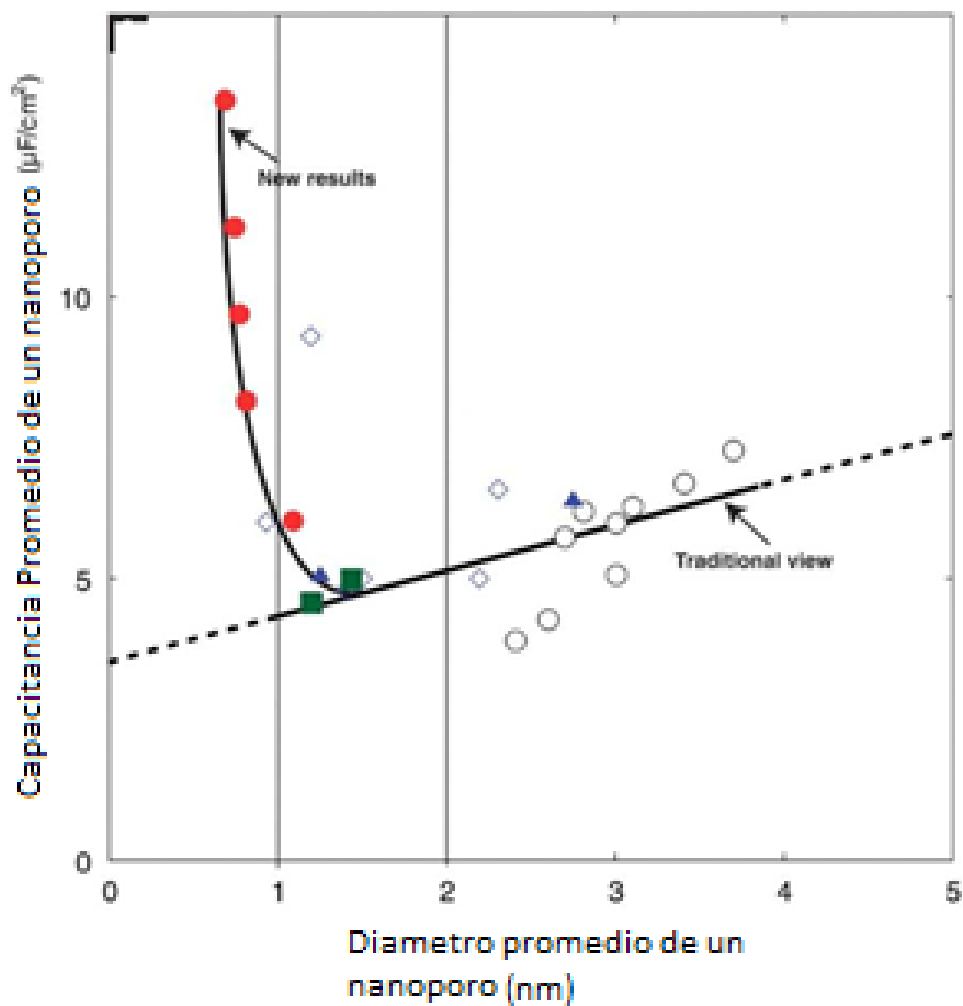


Figura 2: Aquí se muestra la dependencia del valor de la capacitancia con el diámetro de los nanoporos de la matriz [4] para partículas de aproximadamente 1 nanómetro de diámetro.

En la figura 2 se muestra de forma simple los resultados obtenidos en laboratorio, la dependencia de los valores de la capacitancia con el diámetro de los nanoporos es evidente, y es muy significativa cuando el diámetro de los nanoporos se aproxima al diámetro de las partículas de componen al líquido iónico contenido al interior del nanoporo [2,12].

En un supercapacitor la energía almacenada está asociada con el tamaño de la superficie de contacto entre el líquido iónico y las paredes de los nanoporos [5,11]. En este tipo de capacitores, el valor de la capacitancia también depende mucho del potencial eléctrico presente en los nanoporos y de la carga eléctrica impuesta en los extremos del mismo. Además se ha demostrado experimentalmente que se produce un incremento muy elevado de la capacitancia cuando el diámetro de un nanoporo se aproxima al diámetro de un ion, lo que indica un comportamiento diferente de la

capacitancia cuando los iones experimentan cierta falta de libertad de movimiento.

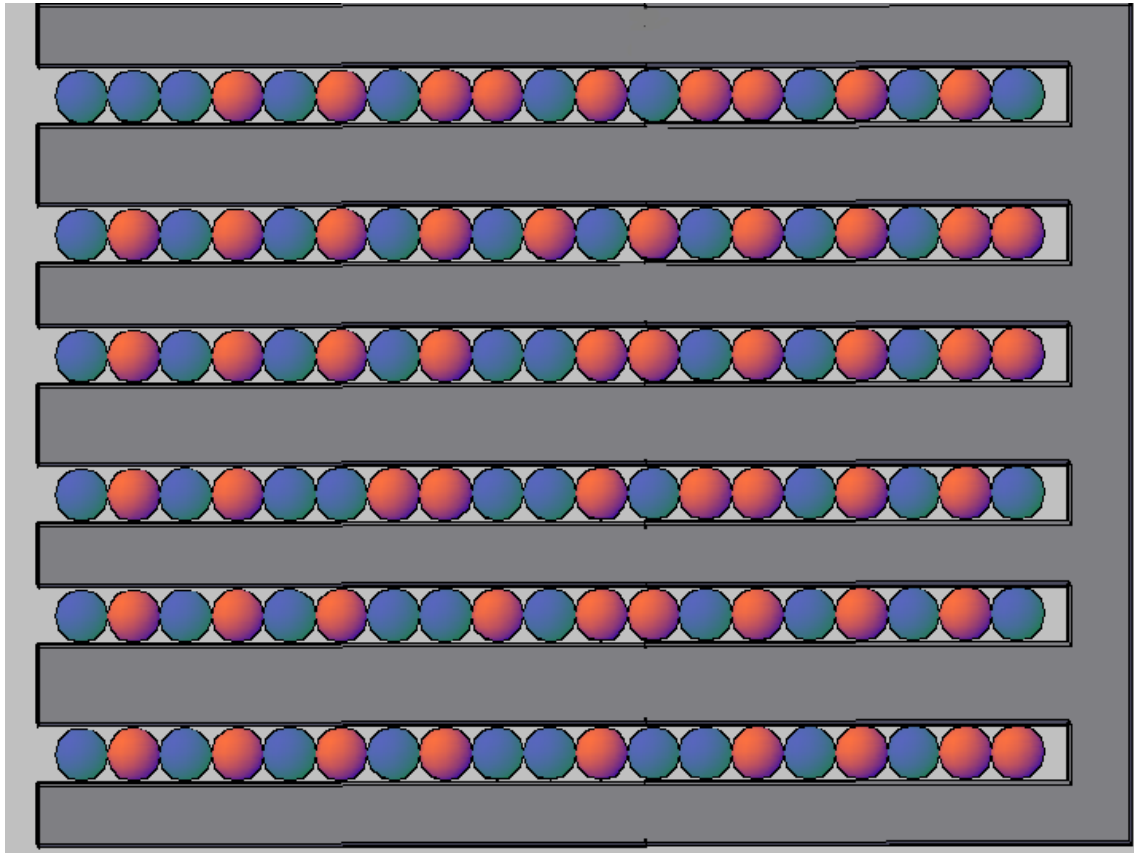


Figura 3: En esta figura se muestra una representación de las partículas eléctricas que componen el líquido iónico al interior de los nanoporos tubulares.

En la figura 3 se muestra de forma simple a las partículas eléctricas que componen el líquido iónico al interior de los nanoporos tubulares. En este trabajo se considera que todas las partículas tienen un tamaño similar.

3. Algoritmo Montecarlo-Metrópoli

Es un conjunto de pasos que mediante la minimización de la energía de un sistema se busca llegar a un estado de equilibrio [2]. Estos pasos son:

- 1) Generar un primer estado del sistema con una energía E_1 .
- 2) Generar un segundo estado del sistema mediante un ligero cambio en el primer estado, este segundo estado tiene ahora una energía E_2 .
- 3) Si la energía del segundo estado es menor que la energía del primer estado, el cambio es aceptado y el segundo estado pasa a ser el nuevo estado. Luego se procede a repetir el algoritmo desde el primer paso.
- 4) Pero si la energía del segundo estado es mayor a la energía del primer estado. Entonces el segundo estado será aceptado como nuevo estado con una probabilidad igual a:

$$P = \exp(-\Delta E/k_B T)$$

La ecuación anterior ha sido extraída de la bibliografía [2]. Donde P es la probabilidad de que ocurra el cambio de un estado a otro. La diferencia de energía entre el segundo estado y el primer estado es ΔE . El valor de k_B es la constante de Boltzman y T es la temperatura absoluta.

Con esta probabilidad y mediante un proceso aleatorio se decide si el segundo estado es aceptado como el nuevo estado. Luego se procede a repetir el algoritmo desde el primer paso.

4. Simulación de un Supercapacitor Poroso

Con el fin de simplificar la simulación de un supercapacitor poroso, se considera un nanoporo tubular recto, por donde pueden desplazarse los iones. Reportes de la literatura [2,5] muestran resultados satisfactorios en este tipo de simulaciones. Al interior del nanoporo tubular se establecen los puntos donde se pueden ubicar las cargas eléctricas, en este trabajo estos puntos se denominan "puntos de la red".

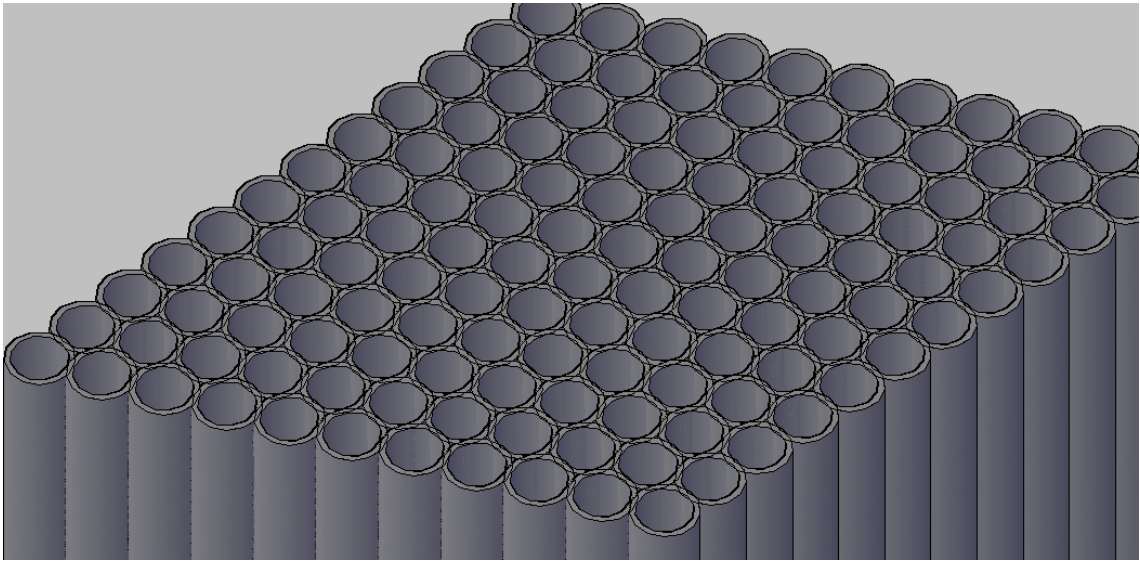


Figura 4: Representación de la matriz de nanoporos tubulares en la que se encuentran alojadas las partículas del líquido iónico.

En la figura 4 se muestra de forma simple la disposición de los nanoporos tubulares que componen la matriz, que a su vez sirve para alojar a las partículas eléctricas que componen el líquido iónico.

En esta simulación se considera que se tiene un conjunto de iones que representan al líquido iónica, con una carga eléctrica total neutra. Considerando también en estos cálculos que las cargas eléctricas tienen un valor adimensional de $+1q$ y $-1q$ para cargas positivas y negativas respectivamente.

El modelo representa a todos los iones como esferas sólidas con cargas eléctricas centradas, y los electrodos son representados con cargas impuestas de la misma magnitud pero de signos opuestos que están fijas en los 2 extremos del nanoporo tubular.

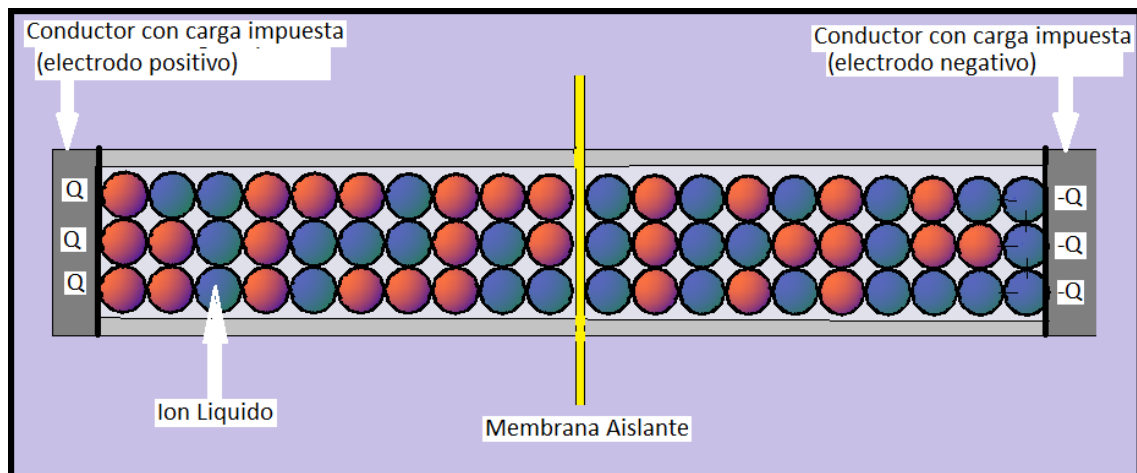


Figura 5: Representación del modelo de simulación donde se muestran los iones en el interior del nanotubo. Q representa la carga eléctrica impuesta en ambos extremos del nanoporo tubular. También se representa una membrana aislante entre ambos electrodos, pero que permite el paso de los iones.

En la figura 5 se ilustran los componentes en el modelo de simulación. Las cargas impuestas ubicadas en los electrodos, el valor de las cargas eléctricas de los iones que componen el líquido iónico y la longitud de los nanoporos tubulares son parámetros de entrada para el modelo de simulación. Además hay otros parámetros de entrada como la temperatura, la permitividad eléctrica, el diámetro de los iones que componen el líquido iónico, y el diámetro del nanoporo tubular.

Para estimar el valor de la capacitancia al interior del nanoporo tubular, se calcula el potencial eléctrico entre las cargas del líquido iónico y la carga impuesta en los extremos (electrodos). Debemos considerar que el potencial eléctrico involucrado en el modelo depende de las cargas impuestas en los extremos y de la ubicación de los iones en el nanoporo. Además, los iones son libres de cambiar posiciones con otros iones de forma aleatoria, lo cual hace variar el potencial constantemente. Por ello, el modelo recurre al principio de mínima energía para determinar el potencial eléctrico promedio, valiéndose del modelo de Montecarlo-Metropolis para determinar si los cambios dentro del modelo (es decir el intercambio de posición de los iones) ocurren o no.

5. Datos Experimentales

Las pruebas realizadas por parte de la Universidad Paul Sabatier en Francia [7] demuestran que existe una relación entre el diámetro de los nanoporos y el diámetro de los iones presentes en el líquido iónico. Según los estudios, cuando el diámetro del nanoporo se encuentra próximo al diámetro de los iones, el valor de la capacitancia aumenta considerablemente, y este se hace más pequeño conforme el diámetro del nanoporo se hace más grande que el diámetro de los iones.

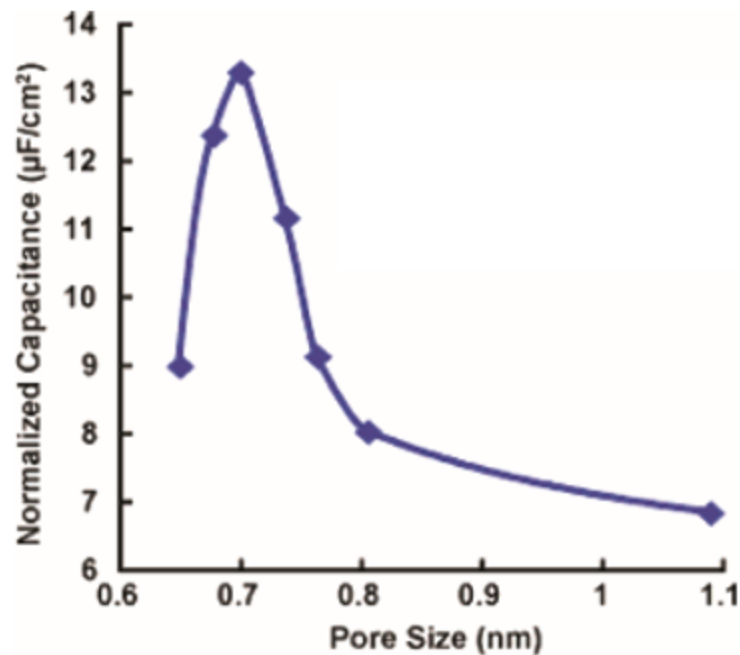


Figura 6: En esta figura se muestran datos reales hechos en laboratorio [7]. Se aprecia claramente que conforme se incrementa el tamaño de los nanoporos la capacitancia disminuye, pero tiene un valor máximo alrededor de 0.7 nm, que es precisamente el tamaño aproximado de las partículas que componen el líquido iónico.

En la figura 6 se muestran los resultados de una prueba experimental que fue llevada a cabo usando como líquido iónico la sustancia llamada *ethyl-methylimidazolium-bis(trifluoromethane-sulfonyl)imide* o por sus siglas EMI-TFSI; además la temperatura en el experimento fue de 60°C o 333K , el diámetro aproximado de las partículas que componen al EMI-TFSI es de 0.7nm. y el valor de la permitividad eléctrica relativa de esta sustancia es de 12. Estas pruebas se llevaron a cabo de tal manera que las cargas impuestas se ubicaban a lo largo del nanoporo, por lo que en el presente trabajo se tomó en cuenta esa información para la simulación de este experimento.

Parte III

Técnicas de Cálculo

6. Cálculo de la Energía de un Estado

En el modelo de simulación los iones al interior del nanoporo tubular son considerados como cargas eléctricas puntuales, además es necesario diferenciar entre las cargas eléctricas de los iones (cargas q) y las cargas eléctricas impuestas en los extremos del modelo (cargas Q). La energía eléctrica en el interior del nanoporo generada por la interacción entre las cargas eléctricas actúa como la energía en el modelo.

La energía potencial eléctrica E_{ij} entre 2 cargas q_i y q_j (donde los subíndices i y j representan a dos cargas eléctricas distintas dentro del modelo) es:

$$E_{ij} = \frac{1}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0} \frac{q_i q_j}{r_{ij}}$$

donde ϵ_r es la permitividad eléctrica relativa y ϵ_0 es la permitividad eléctrica en el vacío

Con el objetivo de hacer más fácil el cálculo, usamos el parámetro adimensional de interacción γ :

$$\gamma = \frac{1}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0 d} \frac{e^2}{k_B T}$$

La ecuación anterior ha sido extraída de la bibliografía [2]. Donde d es la distancia entre dos puntos consecutivos de la red en el modelo (también es el diámetro de los iones), e es el valor absoluto de la carga de un electrón, T es la temperatura, y k_B es la constante de Boltzmann.

Considerando el parámetro γ , la energía potencial eléctrica E_{ij} se escribe como:

$$E_{ij} = \gamma \frac{\tilde{q}_i \tilde{q}_j}{\tilde{r}_{ij}} k_B T$$

La ecuación anterior ha sido extraída de la bibliografía [2]. Donde \tilde{r}_{ij} es la distancia adimensional entre las cargas i y j , los valores que toma son valores enteros positivos o fraccionarios.

$$\tilde{r}_{ij} = \frac{r_{ij}}{d},$$

Los parámetros \tilde{q}_i y \tilde{q}_j son las cargas adimensionales, los cuales toman valores enteros porque representan carga eléctrica de cada ion en número de electrones.

$$\tilde{q}_i = \frac{q_i}{e}, \tilde{q}_j = \frac{q_j}{e},$$

Siendo e la carga del electrón.

Pero cuando una de las cargas eléctricas adimensionales en la ecuación de la energía resulta ser una de las cargas impuestas en los extremos del modelo, entonces se debe considerar que la distancia adimensional entre la carga impuesta y el nodo más cercano es de 0,5 .

En la ecuación del potencial eléctrico aparece la temperatura, pero al reemplazar el valor de γ la temperatura se cancela, lo cual es de esperarse ya que el potencial eléctrico no depende de la temperatura.

Considerando que $\frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 8.988 \times 10^9 N \frac{m^2}{C^2}$; $\epsilon_r = 78.3$; $d = 10^{-9} m$ y $q = 1.602 \times 10^{-19} C$, se tiene que $\gamma = 0.0294 \times 10^{-19} \frac{J}{k_B T}$

Entonces, para un valor de la temperatura de $T = 298 K$, el valor del parámetro γ es igual a: $\gamma = 0.7157$.

7. Modelos de Simulación

Para el presente trabajo se elaboró un programa basado en el modelo ya expuesto, con el fin de estimar la distribución de los iones, potencial eléctrico y capacitancia para distintos valores de temperatura y cargas impuestas. Los resultados del programa son valores adimensionales a partir de los cuales se pueden obtener los valores reales.

En este modelo, la distribución promedio de las cargas adimensionales en el sistema dado será una consecuencia de la temperatura, la distribución de Boltzmann, el principio de mínima energía y la carga impuesta.

Teniendo como base el algoritmo ya expuesto, se pueden crear toda una variedad de modelos. En este trabajo toma en cuenta dos modelos, cuya única diferencia es que mientras que en uno se considera que la carga impuesta se ubica exclusivamente en los extremos del nanoporo tubular (que a partir de ahora pasara a llamarse primer modelo), en el otro la carga impuesta se distribuye uniformemente en las paredes del nanoporo (que a partir de ahora pasara a llamarse segundo modelo).

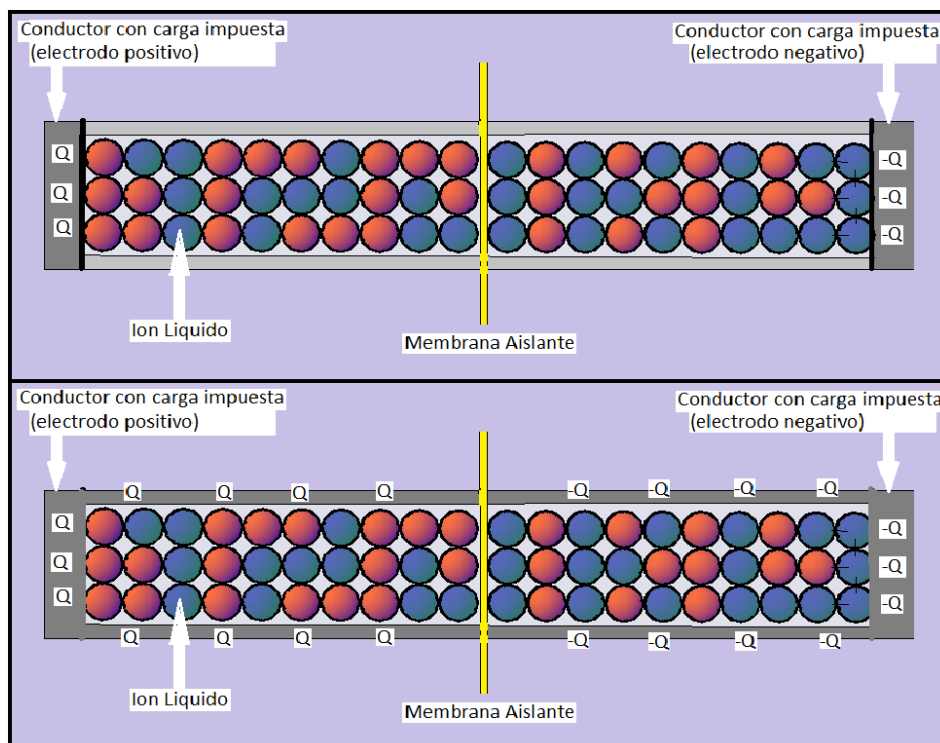


Figura 7: Representación de los dos modelos utilizados en este trabajo. En el primer modelo (arriba) se consideran cargas impuestas en los extremos del nanoporo tubular. En el segundo modelo (abajo) se consideran cargas impuestas en todas las paredes del nanoporo.

En la figura 7, se ilustran los dos sistemas simulados en este trabajo. La parte superior de la figura muestra un nanoporo en el que las cargas impuestas se ubican exclusivamente en los extremos del nanoporo tubular, la simulación de este sistema se denomina en este trabajo como primer modelo. La parte inferior de la figura muestra un nanoporo en el que las cargas impuestas se ubican a lo largo de todas las paredes del nanoporo tubular, la simulación de este sistema se denomina en este trabajo como segundo modelo.

8. Pasos del Modelo de Simulación

Siguiendo los pasos establecidos en el algoritmo de Montecarlo-Metropolis, que minimiza la energía de un modelo con el fin de estabilizarlo, el presente trabajo aplica este algoritmo [2] de la siguiente manera:

- a) Generar aleatoriamente una primera muestra, que consiste en un conjunto de iones con cargas positivas y negativas al interior de un nanoporo de forma tubular, el cual tiene en un extremo una carga eléctrica positiva y en el otro una carga eléctrica negativa.
- b) Calcular la energía potencial eléctrica entre los iones y la carga impuesta en los extremos del nanoporo para la primera muestra.
- c) Elegir aleatoriamente dos iones e intercambiarlos de lugar, generando así una segunda muestra.
- d) Calcular la energía potencial eléctrica entre los iones y la carga impuesta en los extremos del nanoporo para la segunda muestra.
- e) Si la energía potencial eléctrica de la primera muestra es mayor o igual que la energía potencial eléctrica de la segunda muestra. Entonces desechamos la primera muestra, tomamos nota de la ubicación de los iones de la segunda muestra, tomamos la segunda muestra como la primera muestra y repetimos los pasos desde el paso b.
- f) Pero si la energía potencial eléctrica de la primera muestra es menor que la energía potencial eléctrica de la segunda muestra, entonces elegimos un número aleatorio λ entre 0 y 1. Luego hacemos el siguiente cálculo:

$$P = \exp(-\Delta E/k_B T)$$

La ecuación anterior ha sido extraída de la bibliografía [2]. Donde P es la probabilidad de que ocurra el cambio de un estado a otro. La diferencia de energía entre el primer estado y el segundo estado es ΔE .

$$\Delta E = E_{\text{SegundoEstado}} - E_{\text{PrimerEstado}}$$

Luego verificamos la siguiente expresión :

$$P > \lambda$$

Si λ es menor que P entonces desechamos la primera muestra, tomamos nota de la ubicación de los iones de la segunda muestra, tomamos la segunda muestra como la primera muestra y repetimos los pasos desde el paso b .

Pero si λ es mayor que P entonces desechamos la segunda muestra, tomamos nota de la ubicación de los iones de la primera muestra, mantenemos a la primera muestra como tal y repetimos los pasos desde b .

Cuando una muestra es aceptada, las posiciones de los iones al interior del nanoporo son almacenadas, con el fin de promediar la carga eléctrica en cada punto de la red después de cientos de miles de iteraciones. estos valores promedio son usados para determinar el potencial eléctrico entre los extremos del nanoporo, mediante la siguiente fórmula:

$$V = \sum_i \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \right) \frac{q_i}{r_i}$$

Donde V es el potencial eléctrico en los extremos del nanoporo tubular, q_i es la carga eléctrica promedio en un punto de la red y r_i es la distancia entre el punto de la red y los extremos del nanoporo tubular.

Finalmente, la capacitancia se calcula de la siguiente manera:

$$C = \frac{\Delta Q}{\Delta V}$$

Donde C es la capacitancia en el nanoporo, V es el potencial eléctrico en el interior del nanoporo y Q es la carga impuesta en el nanoporo.

En este trabajo se busca estimar los valores de potencial eléctrico y capacitancia que se generan al interior de un nanoporo bajo ciertas condiciones. Se elijen 3 nanoporos de distinto diámetro y progresivamente se acumula carga eléctrica en los extremos del mismo, considerando una temperatura de $300K$, líquidos iónicos con un diámetro de $0.7nm$ y $1nm$, con valores de permitividad eléctrica relativa de 16, 55 y 80. Conforme la carga impuesta en los extremos aumenta, los valores de capacitancia y potencial eléctrico en los nanoporos varia de forma que se pueden graficar, y en algunos casos aparecen picos en la gráfica de la capacitancia.

Segun la bibliografía [2], la aparición de esos picos se debe a valores bajos temperatura. Cuando la temperatura es alta (como a $300K$) los picos desaparecen y los aumentos en la capacitancia son leves.

En este trabajo se busca mostrar otra forma de producir esos picos. En lugar de recurrir a las bajas temperaturas, se toma distintos valores de permitividad eléctrica relativa que representan a distintos líquidos iónicos. De esta manera se busca en la práctica generar los picos de capacitancia sin recurrir a un sistema de refrigeración, sino solamente eligiendo un líquido iónico adecuado.

Además se mostrará como varían y que valores presentan tanto la capacitancia como el potencial eléctrico a medida que variamos el diámetro de los nanoporos tubulares.

Parte IV

Resultados Obtenidos

9. Aplicación del Modelo a las Condiciones del Experimento

Considerando las condiciones experimentales e introduciendo los valores de esos parámetros en el algoritmo del modelo de simulación, se pueden estimar los valores de capacitancia experimental expuestos anteriormente para un rango de diámetros de nanoporo que varía entre 0.7 nm y 1.1 nm. Además se considero un valor para la carga impuesta en los extremos del nanoporo de $18\mu C/cm^2$.

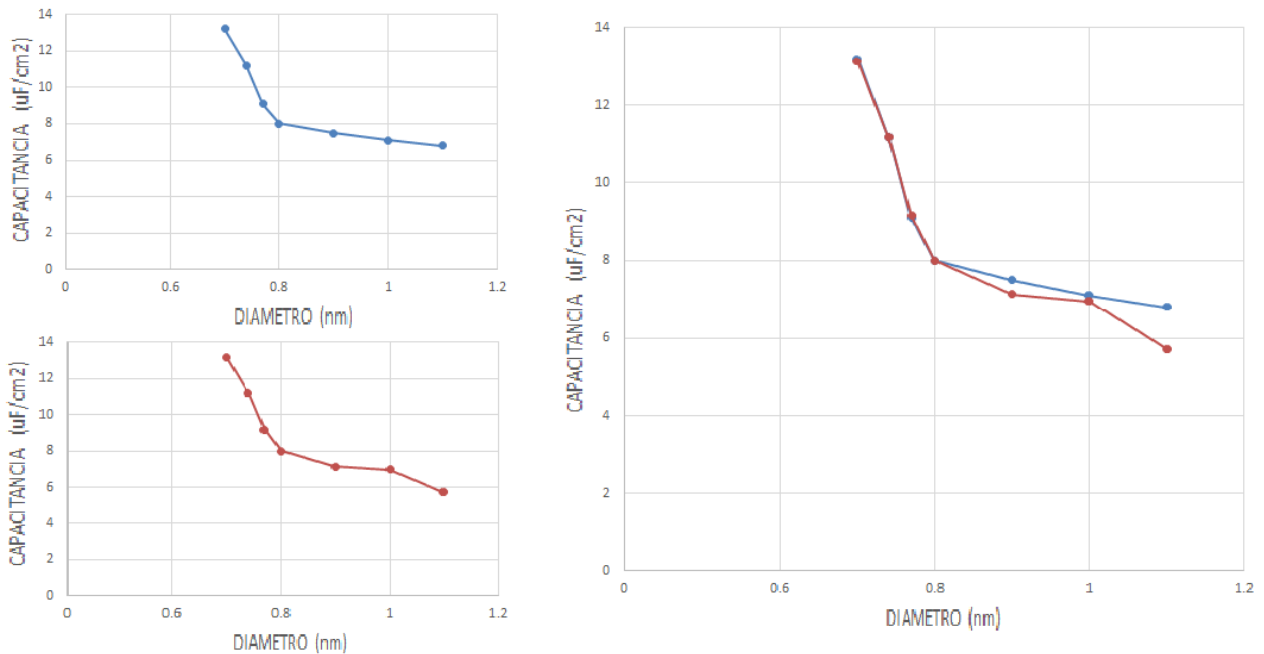


Figura 8: Aquí se muestran datos reales hechos en laboratorio [7] (en azul), y los datos obtenidos por medio del programa de simulación (en ámbar). Se aprecia claramente que en ambos casos conforme se incrementa el tamaño de los nanoporos la capacitancia disminuye, pero tiene un valor máximo alrededor de 0.7 nm.

En la figura 8 se muestra una comparación entre los datos obtenidos en el laboratorio, y los resultados obtenidos a partir del programa de simulación. En los experimentos, las cargas impuestas estaban a lo largo de las paredes del nanoporo, por lo que en el presente trabajo se usó el segundo modelo para simular el sistema usado en el experimento. Con esta comparación, se puede considerar que el programa de simulación tiene una aproximación aceptable.

10. Comparación con el metodo de Dinamica Molecular

Los datos experimentales expuestos en la sección anterior fueron usados previamente en otro trabajo [9] para compararlos con los resultados obtenidos mediante una simulación que utilizó el método de Dinámica Molecular Clásica (método que utiliza las leyes de Newton y el cálculo computacional para predecir las posiciones y velocidades de las partículas del modelo en cada instante de tiempo).

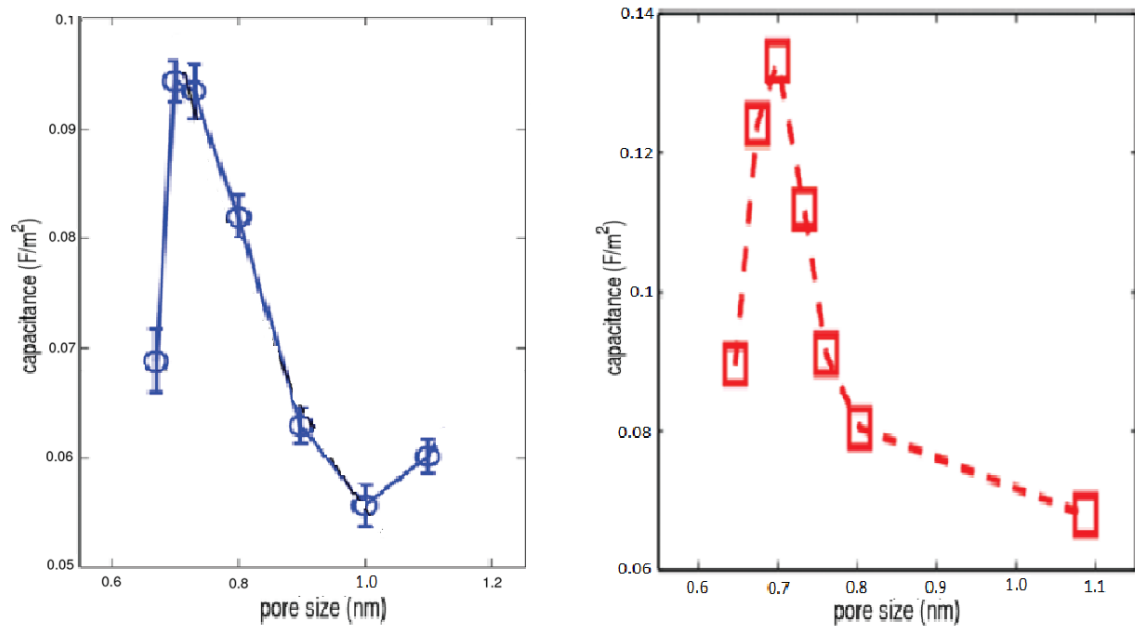


Figura 9: La gráfica muestra datos de la variación entre la capacitancia y el diámetro del nanoporo obtenidos por dos métodos, en azul los resultados obtenidos con el modelo de Dinámica Molecular Clásica (izquierda) [9], y los resultados experimentales [7] en rojo (derecha).

La figura 9 nos muestra que los resultados de esta simulación es cercana a los datos experimentales. Incluso tiene un comportamiento similar alrededor de 0.7nm cuando los valores de la capacitancia se incrementan.

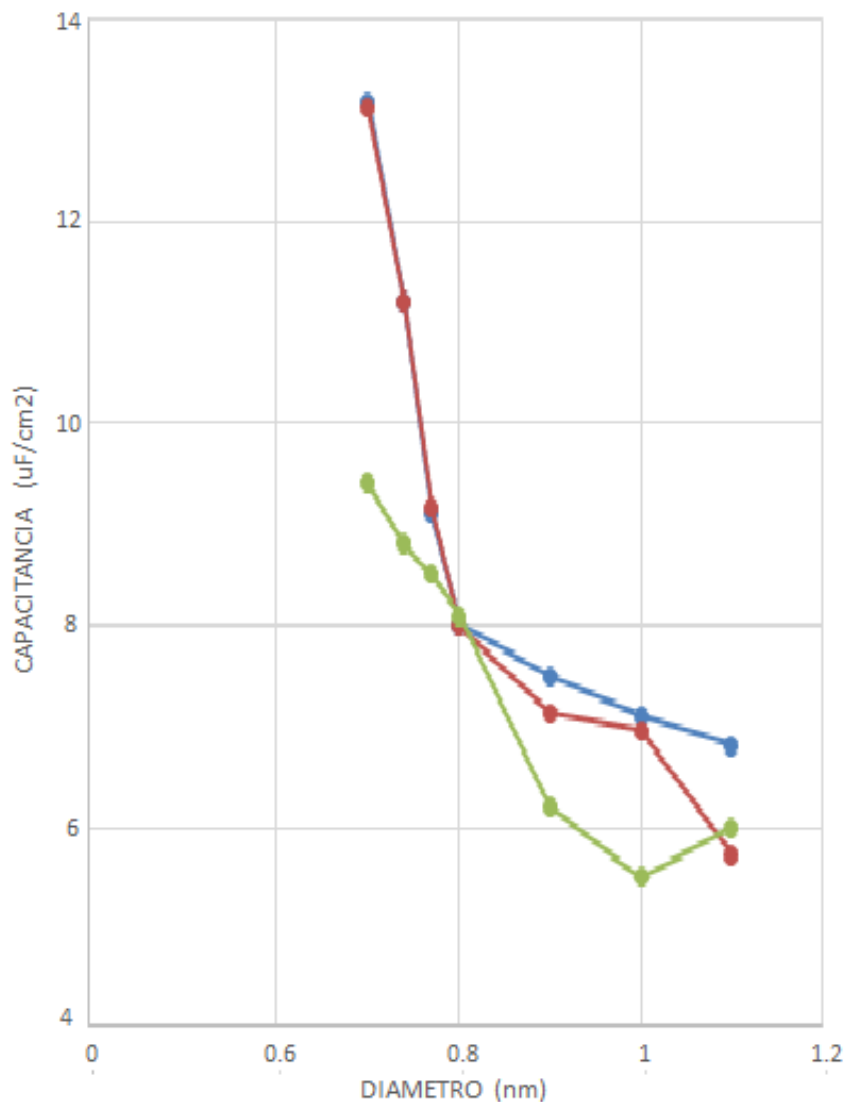


Figura 10: La gráfica muestra datos de la variación entre la capacitancia y el diámetro del nanoporo obtenidos por tres métodos, los resultados obtenidos con el modelo de Dinámica Molecular Clásica (en verde) [9], los resultados obtenidos experimentalmente [7] (en azul) y los resultados obtenidos con el modelo de Montecarlo Metrópoli (en rojo).

En la figura 10 podemos ver la comparación entre los valores reales, los valores simulados con el método de Dinámica Molecular Clásica y los valores simulados con el método de Montecarlo Metrópoli. Y si bien los resultados de ambos métodos de simulación presentan similitudes, los resultados del método de Montecarlo Metrópoli se acercan más a los datos reales. Esto posiblemente se deba al hecho de que el método de Dinámica Molecular Clásica usa las leyes de Newton, mientras que el método de Montecarlo Metrópoli utiliza un proceso aleatorio; y como sabemos, las partículas tienen una naturaleza no determinística.

11. Comparación entre la programación de esta tesis y la de un trabajo previo

Uno de los trabajos en los que esta basada esta tesis trata del uso del mismo metodo de Montecarlo Metr6poli aplicado a unos datos particulares [2], obviamente la programación de ese trabajo es distinta a la programación de esta tesis. En esta sección se hace una comparación entre una gráfica obtenida a partir de la programación en ese trabajo previo [2] y una gráfica obtenida usando el programa hecho para esta tesis. Es de esperar que ambas gráficas sean muy similares.

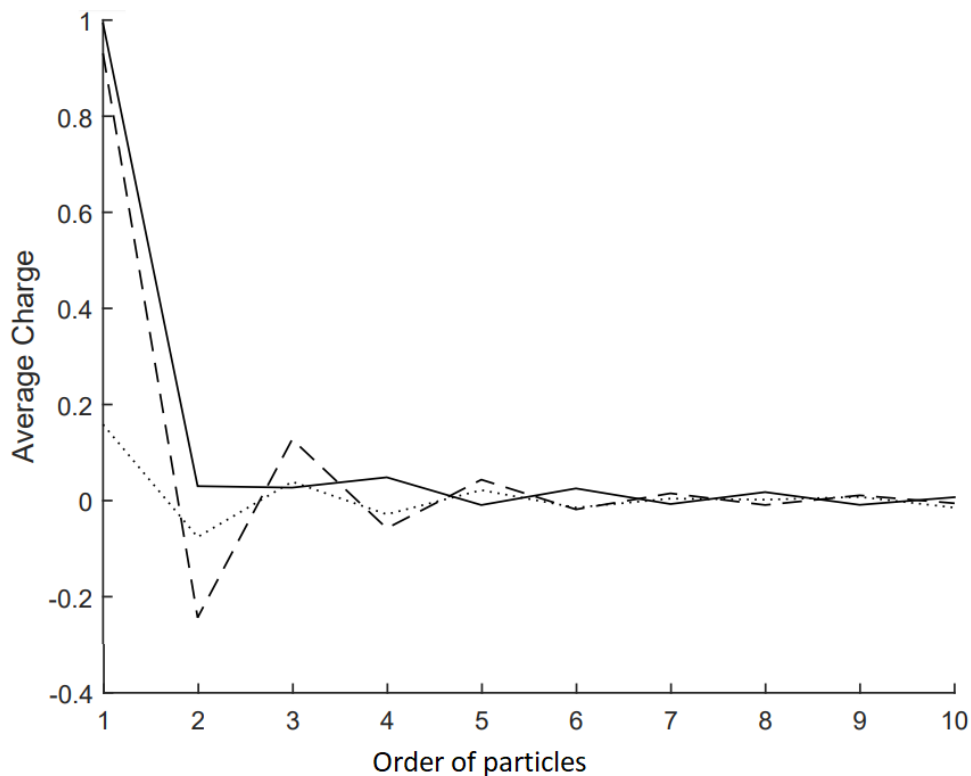


Figura 11: densidad de carga eléctrica adimensional a lo largo de la mitad de un nanoporo tubular, esta información fue tomada de la bibliografía [2]. Tomando un valor de lamda de 1 (que depende de la temperatura, diámetro del nanoporo y permitividad eléctrica relativa del líquido iónico) ; y una carga impuesta adimensional de 0.1 (línea punteada), 1 (línea discontinua) y 1.7 (línea continua).

La figura 11 muestra las densidades electricas adimensionales a lo largo de la mitad de un nanoporo tubular (se expone solo la mitad por la simetría del modelo) extraída de la bibliografía [2]. Luego, usando la programación desarrollada para esta tesis aplicada a los mismos valores de carga impuesta adimensional y lamda, se obtendrá una gráfica que deberá ser similar a la gráfica anterior.

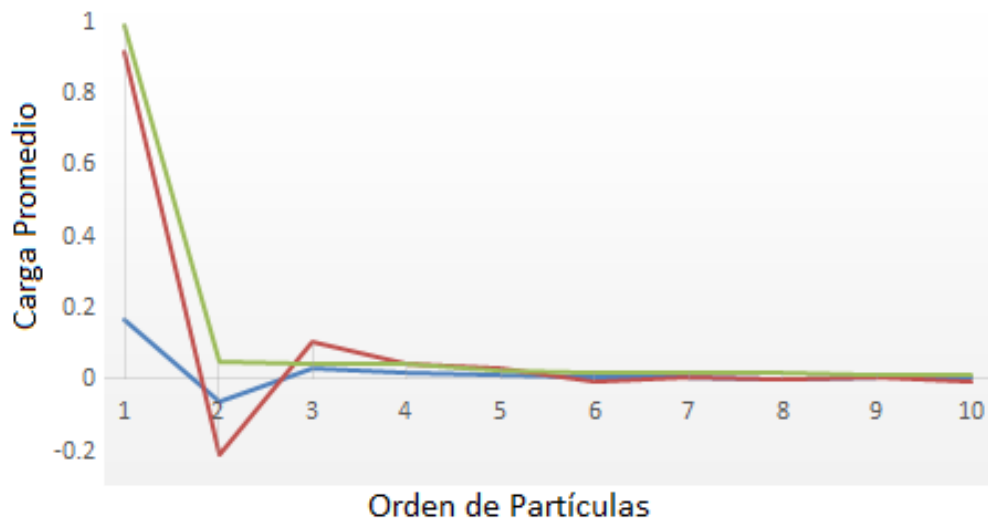


Figura 12: densidad de carga eléctrica adimensional a lo largo de la mitad de un nanoporo tubular, obtenida a partir de la programación hecha para esta tesis. Tomando un valor de λ de 1; y una carga impuesta adimensional de 0.1 (azul), 1 (rojo) y 1.7 (verde).

La figura 12 es similar a la figura 11, lo que demuestra que ambas programaciones coinciden en sus resultados. Cualquier diferencia entre ambos resultados se debe posiblemente al número de iteraciones utilizadas en ambos trabajos.

12. Simulación de un Nanoporo para la Estimación del Potencial Eléctrico y la Capacitancia

En esta sección se usó el modelo de simulación para estimar el potencial eléctrico y la capacitancia de nanoporos tubulares de distintos diámetros, temperatura y permitividad eléctrica relativa del líquido iónico, tanto para el primer modelo como para el segundo modelo.

12.1. Simulación con el Primer Modelo

En esta parte se estudia el comportamiento de la capacitancia y el potencial eléctrico para el caso en el que las cargas impuestas en los electrodos permanecen en los extremos del nanoporo.

Primero se aplicó el modelo de simulación para estudiar los efectos que tiene la longitud del nanoporo en el potencial eléctrico. Para ello se fijaron como constantes los siguientes parámetros; la temperatura tomo un valor de $300K$, el diámetro de los iones tomo una valor de $1.0nm.$, al igual que el diámetro del nanoporo tubular, una carga impuesta adimensional con valor de 3 en los extremos del nanoporo y por último el valor de la permitividad eléctrica relativa tomó un valor de 55. Dejando como únicas variables en el modelo al potencial eléctrico y la longitud del nanoporo tubular.

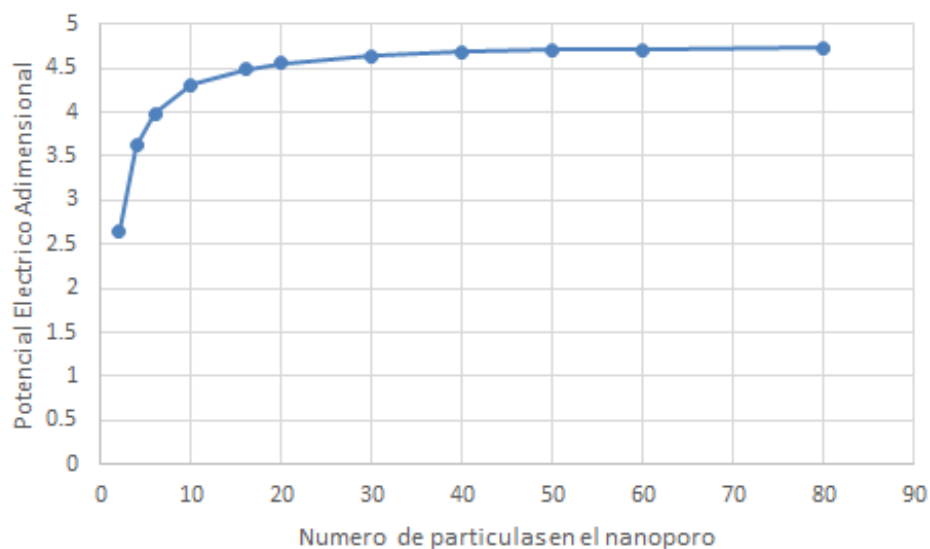


Figura 13: En esta figura se muestra la variación del potencial eléctrico adimensional a medida que aumentamos la longitud del nanoporo tubular.

La figura 13 nos muestra el comportamiento del potencial eléctrico a medida que variamos la longitud del nanoporo. Se observa que alrededor de una longitud de 40 ya no existen aumentos importantes del potencial eléctrico en comparación con longitudes más cortas. Por esto es recomendable hacer cálculos considerando una longitud de nanoporo tubular equivalente a 40 veces el diámetro de las partículas que componen el líquido iónico .

Ahora se muestra el promedio de densidad de carga eléctrica adimensional al interior del nanoporo tubular a medida que aumentamos la carga impuesta en los extremos del mismo.

En las siguientes tablas se mostrarán solamente los resultados de las cargas promedio adimensionales de la mitad del nanoporo tubular debido a la simetría del modelo.

Ahora con el fin de evaluar los valores de la carga promedio adimensional a lo largo del nanoporo tubular cuando se alcanza el equilibrio en el sistema, se aplica el programa de simulación a un modelo compuesto por un nanoporo tubular de un diámetro igual al diámetro de los iones, con una longitud igual al diámetro de 40 iones, conteniendo 20 iones con carga positiva (de valor +1) y 20 iones con carga negativa (de valor -1), con un valor para la permitividad eléctrica relativa de 80 y una temperatura de $300K$.

Los resultados que se muestran a continuación corresponden a valores de carga impuesta adimensional que aumentan progresivamente, esto servirá para ilustrar de la forma mas sencilla el comportamiento de las cargas al interior del nanoporo tubular. Es necesario recordar que todos los resultados que se presentan corresponden a sistemas que han alcanzado el equilibrio.

En estas tablas se observa como aumenta la carga promedio adimensional a lo largo del nanoporo tubular, al aumentar la carga eléctrica impuesta en los extremos.

Carga impuesta adimensional $Q=0$: cuando la carga impuesta en los extremos es cero, la carga promedio adimensional a lo largo del nanoporo tubular es prácticamente cero. Debido a que la energía cinética promedio de los iones es grande comparada con la energía eléctrica entre los iones.

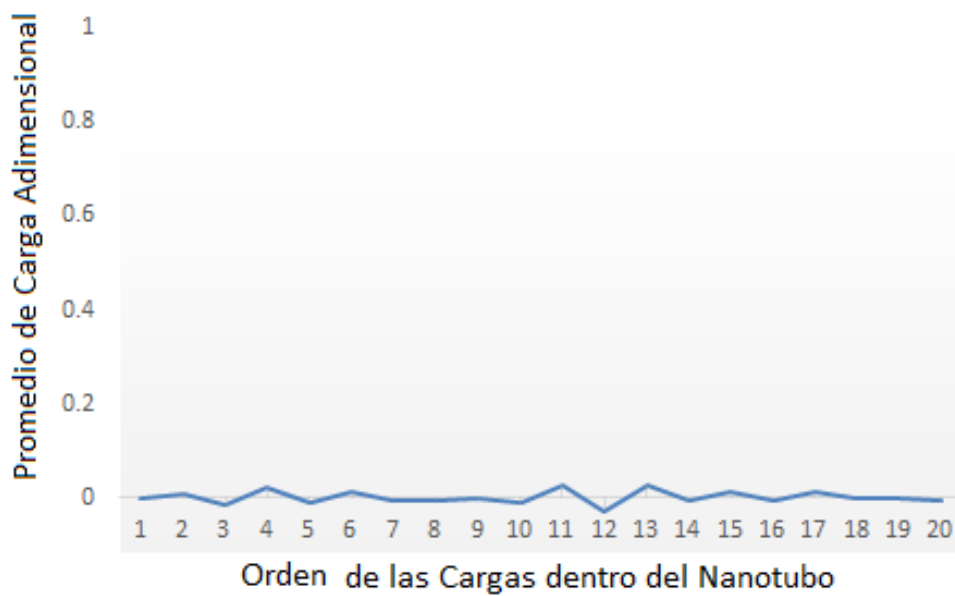


Figura 14: Resultados del promedio de carga eléctrica adimensional a lo largo del nanoporo tubular, obtenida a partir del programa en lenguaje C++ para una carga impuesta adimensional nula en los extremos. Se observa que todos los valores son prácticamente cero.

En la figura 14 se muestra la variación promedio de la carga eléctrica adimensional desde la posición "1" (la más cercana a la carga impuesta en el extremo) hasta la posición "20" a la mitad del nanoporo tubular.

Carga impuesta adimensional $Q=1$: cuando aumentamos la carga impuesta adimensional en los extremos, la carga promedio adimensional del primer nodo aumenta y su signo es contrario al de la carga impuesta. Además, en el segundo nodo la carga promedio adimensional depende mucho de la carga promedio adimensional del primer nodo, pero la carga impuesta tiene poco efecto sobre el segundo nodo debido a que el valor de la carga impuesta es todavía muy pequeño para influenciar en el valor de la carga promedio adimensional del segundo nodo.

Cuando el valor que adquiere la variable γ es relativamente bajo (cuando los valores del diámetro de los iones, temperatura o permitividad eléctrica relativa son relativamente más altos) la energía cinética es suficientemente grande comparada con la energía eléctrica entre los iones. Lo que ocasiona que los iones cambian fácilmente de lugar, lo que disminuye el valor de la carga promedio adimensional en cada nodo.

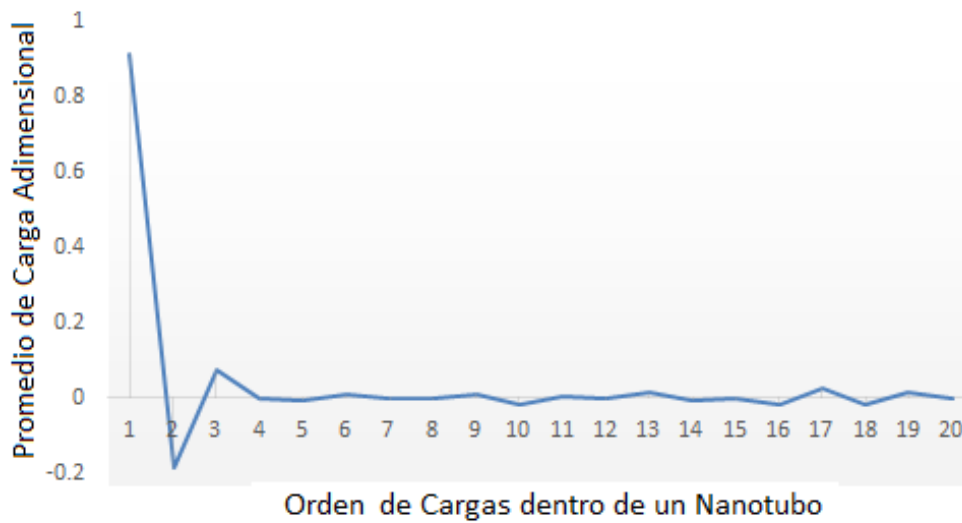


Figura 15: Promedio de carga eléctrica adimensional a lo largo del nanoporo tubular, obtenida a partir del programa en lenguaje C++ para una carga impuesta adimensional de 1.

En la figura 15 se muestra la variación del promedio de la carga eléctrica adimensional desde la posición 1 (la mas cercana a la carga impuesta en el extremo) hasta la posición 20 a la mitad del nanoporo tubular del lado positivo del modelo. En este caso, debido a la presencia de la carga impuesta se presenta un incremento de valores en el extremo cercano a la carga impuesta.

Carga impuesta adimensional $Q=2$: Se observa que en el segundo nodo el resultado de la suma de potenciales eléctricos adimensionales de la carga impuesta y la carga del primer nodo es más cercano a cero que en el caso anterior. Debido a esto, el promedio de carga adimensional en el segundo nodo disminuye, ya que la energía cinética promedio en el segundo nodo es grande comparada con la energía eléctrica. Y al igual que en el caso anterior, un valor relativamente alto de la variable γ ocasiona que el resto de los nodos tenga un valor de promedio de carga eléctrica adimensional cercana a cero.

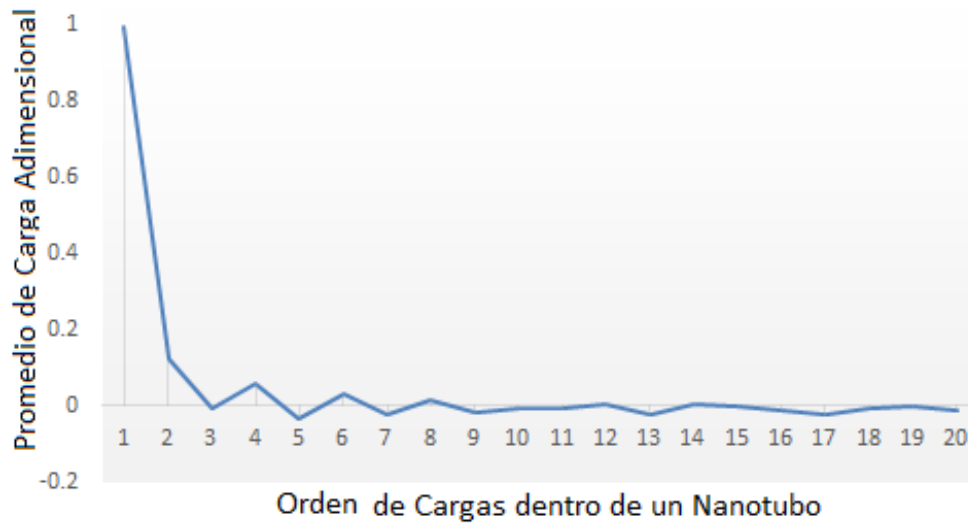


Figura 16: Promedio de carga eléctrica adimensional, obtenida a partir del programa en lenguaje C++ para una carga eléctrica adimensional de 2. Se observa que los nodos cerca al extremo del nanoporo tubular comienzan a adquirir valores positivos.

En la figura 16 vemos un comportamiento similar al caso anterior, pero ligeramente más pronunciado en las primeras posiciones debido a un mayor valor para la carga impuesta en el extremo.

Carga impuesta adimensional $Q=3$: En este caso el potencial eléctrico adimensional de la carga impuesta sobre el segundo nodo tiene una magnitud mayor que el potencial eléctrico adimensional de la carga promedio adimensional del primer nodo sobre el segundo nodo, lo que ocasiona que el promedio de carga adimensional en el segundo nodo aumente, con signo contrario a la carga impuesta.

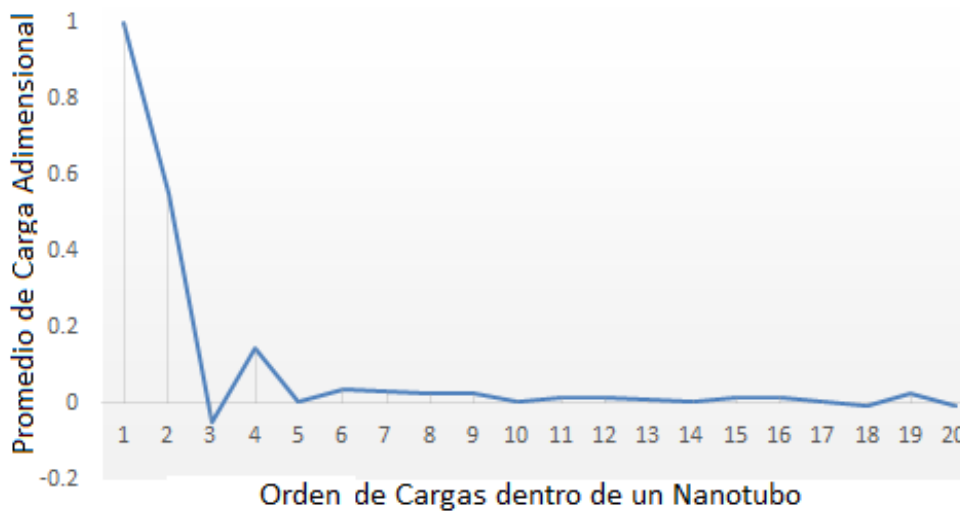


Figura 17: Promedio de carga eléctrica adimensional a lo largo del nanoporo tubular, obtenida a partir del programa en lenguaje C++ para una carga impuesta adimensional de 3. Se observan los mayores valores al extremo del nanoporo.

La figura 17 muestra el mismo comportamiento que el caso anterior, pero con la observación de que los valores se hacen cada vez mayores, pero nunca mayor que 1.

Carga impuesta adimensional $Q=4$: Se observa que el promedio de carga eléctrica adimensional positiva a lo largo del nanoporo tubular aumenta gradualmente conforme aumentamos la carga impuesta en los extremos del mismo. Lo cual es lógico pues se está elevando el valor de la carga impuesta, lo que atrae cada vez más iones del signo contrario a esta.

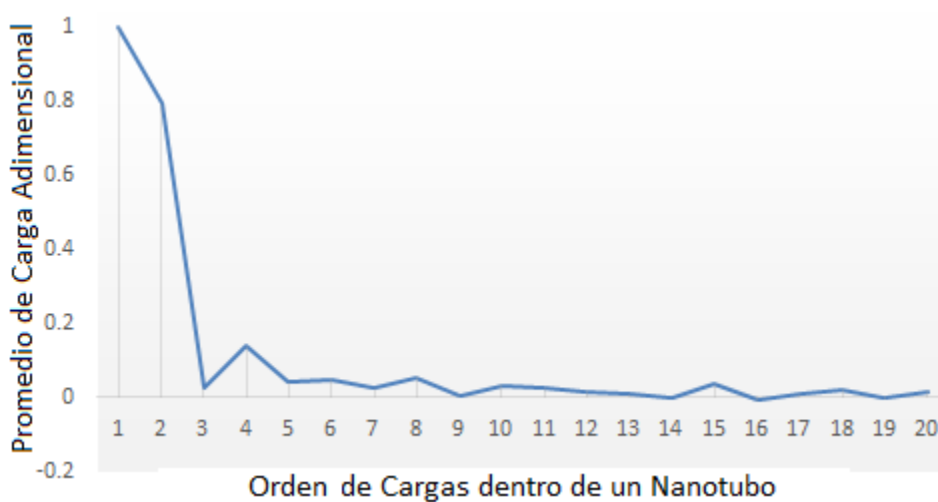


Figura 18: Promedio de carga eléctrica adimensional a lo largo del nanoporo tubular, obtenida a partir del programa en lenguaje C++ para una carga impuesta adimensional de 4. Los valores tienden a tomar cantidades positivas de forma gradual.

En la figura 18 tenemos la misma tendencia que en el caso anterior, lo que evidencia un comportamiento predecible para el promedio de carga eléctrica a lo largo del nanoporo tubular. En el modelo, se puede explicar este comportamiento como una consecuencia de la distribución de Boltzmann usado en el algoritmo Montecarlo-Metrópoli. Cuanto más alta es la temperatura, la permitividad eléctrica relativa o el diámetro de los iones que componen el líquido iónico; es más probable que se efectúen cambios de un estado a otro en el sistema, razón por la cual en la mayoría de los nodos en el nanoporo tubular el promedio de la carga adimensional es cercano a cero, pues a mayor número de cambios el promedio se acerca más al valor de cero. Ahora se muestran los resultados producidos al aplicar el algoritmo de simulación a nanoporos tubulares de distinto diámetro y permitividad eléctrica relativa.

12.1.1. Nanoporo con un diámetro igual al diámetro de los iones

Ahora se muestran los casos de dos líquidos iónicos distintos, uno con una permitividad eléctrica relativa de 80 (primer caso) y otro con una permitividad eléctrica relativa de 16 (segundo caso). Considerando el resto de parámetros como temperatura y diámetro de las partículas del líquido iónico con valores constantes de $300K$ y $0,7$ nm respectivamente.

Para el primer caso, al aplicar el modelo de simulación obtenemos una serie de valores entre el potencial eléctrico adimensional, la capacitancia adimensional y la carga impuesta adimensional en los nanoporos tubulares.

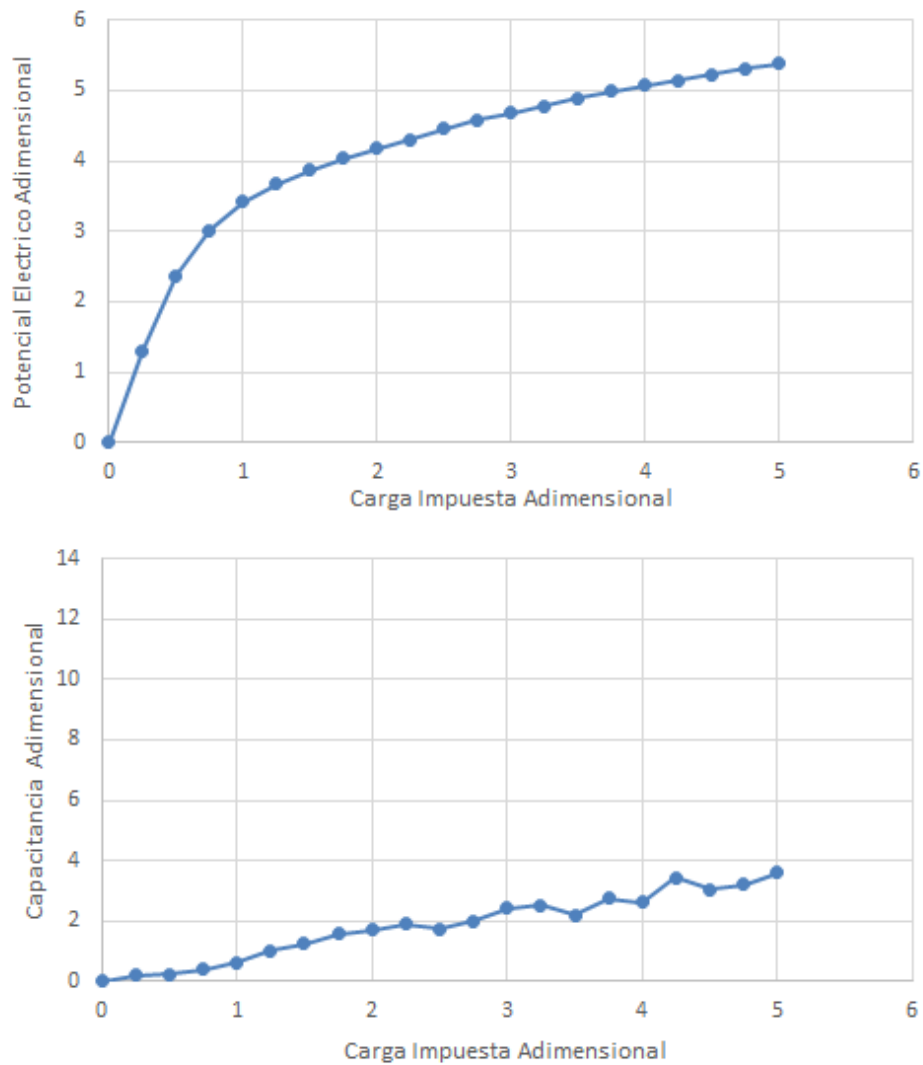


Figura 19: La figura muestra el comportamiento del potencial eléctrico adimensional (arriba) y la capacitancia adimensional (abajo) cuando varía la carga impuesta adimensional en los extremos del nanoporo tubular. Habiendo usado el primer modelo, para una permitividad eléctrica relativa de 80, cuando el diámetro del nanoporo tubular es igual al diámetro de las partículas que componen el líquido iónico.

En la figura 19 vemos como el potencial eléctrico adimensional experimenta aumentos que van disminuyendo a medida que aumentamos el valor de la carga impuesta adimensional. Con respecto a la capacitancia, esta aumenta con un ritmo muy lento, tomando valores relativamente bajos.

Ahora tomamos los valores adimensionales obtenidos en este caso e incluimos las unidades con las que se contabilizan los parámetros de entrada. Con esto se puede presentar los valores obtenidos

con las unidades respectivas.

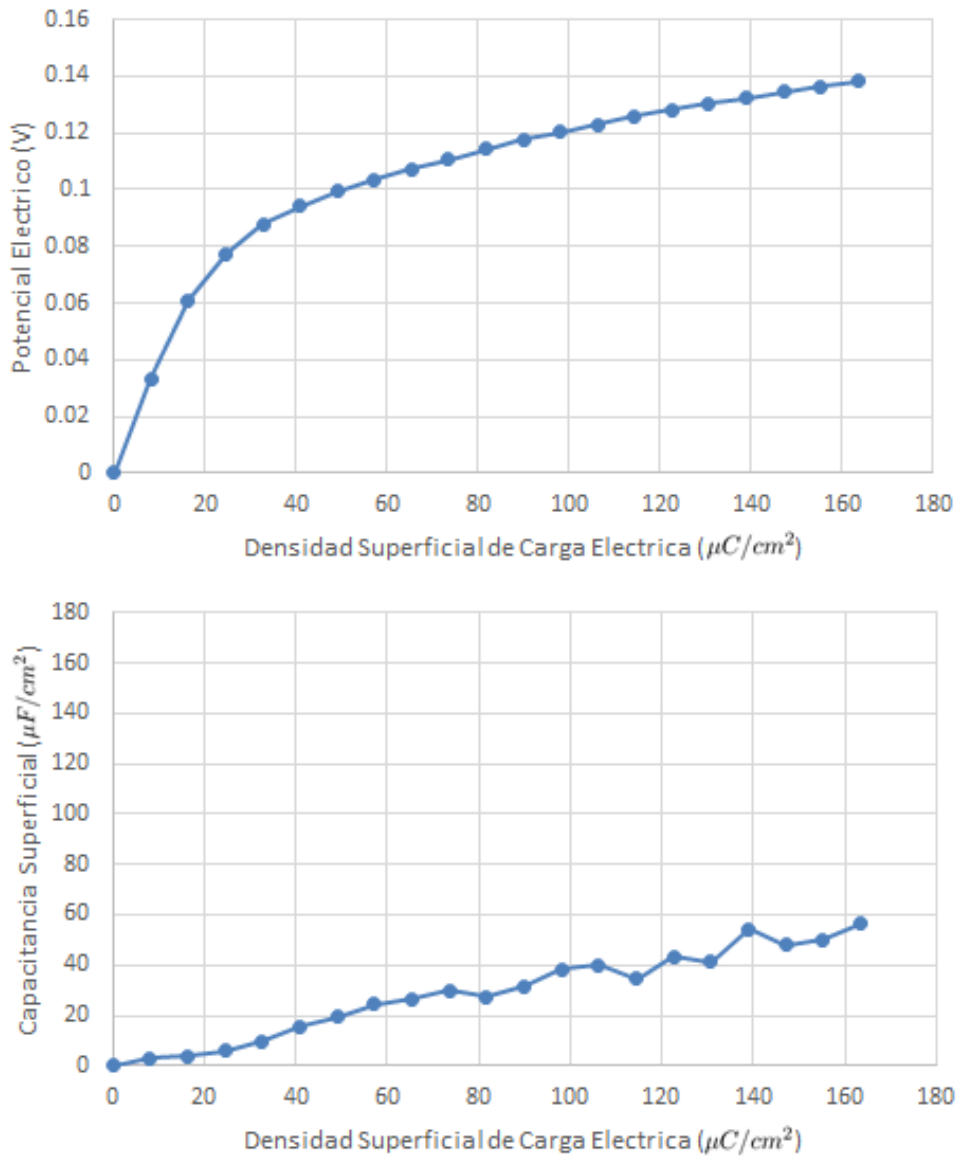


Figura 20: La figura muestra el comportamiento y valores del potencial eléctrico (arriba) y la capacitancia superficial (abajo) cuando varía la densidad de carga eléctrica superficial impuesta en los extremos del nanoporo tubular. Esta tabla es la misma que la anterior, pero incluyendo las unidades respectivas y para una permitividad eléctrica relativa de 80 .

En la figura 20 vemos como el potencial eléctrico experimenta aumentos que van disminuyendo a medida que aumentamos el valor de la densidad de carga eléctrica superficial impuesta en los extremos del nanoporo tubular. Con respecto a la capacitancia, esta aumenta con un ritmo muy lento.

Para el segundo caso, al aplicar el modelo de simulación obtenemos una serie de valores entre

el potencial eléctrico adimensional, la capacitancia adimensional y la carga impuesta adimensional en el nanoporo tubular que se muestran a continuación.

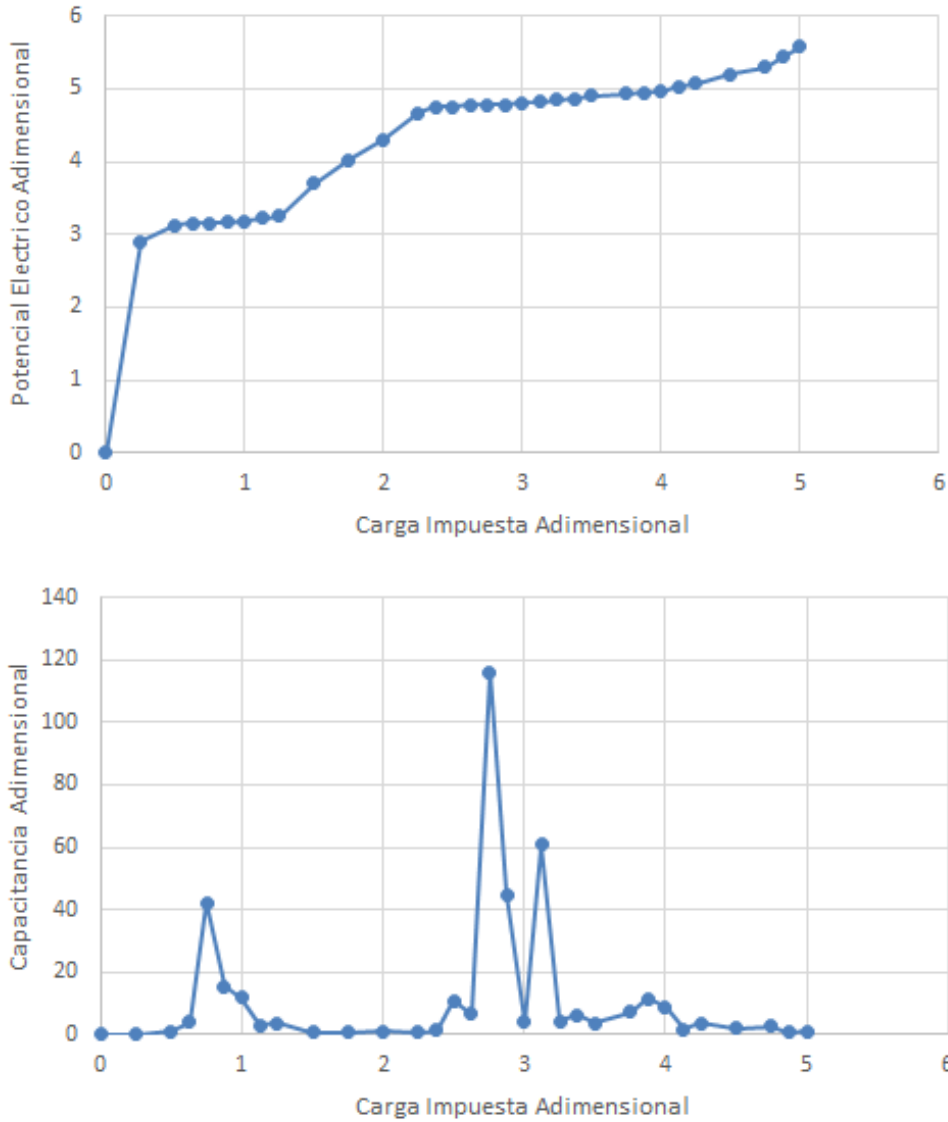


Figura 21: La figura muestra el comportamiento del potencial eléctrico adimensional (arriba) y la capacitancia adimensional (abajo) cuando varía la carga impuesta adimensional en los extremos del nanoporo tubular. A diferencia de la figura anterior los valores de la capacitancia adimensional alcanzan grandes picos debido al valor de la permitividad eléctrica relativa, que es mas baja que en el caso la anterior. Habiendo usado el primer modelo, para una permitividad eléctrica relativa de 16, cuando el diámetro del nanoporo tubular es igual al diámetro de las partículas que componen el líquido iónico.

En la figura 21 se aprecian aumentos muy grandes en la capacitancia adimensional (Anexo D)

en comparación al caso anterior. A continuación se muestra la misma figura pero incluyendo las unidades respectivas.

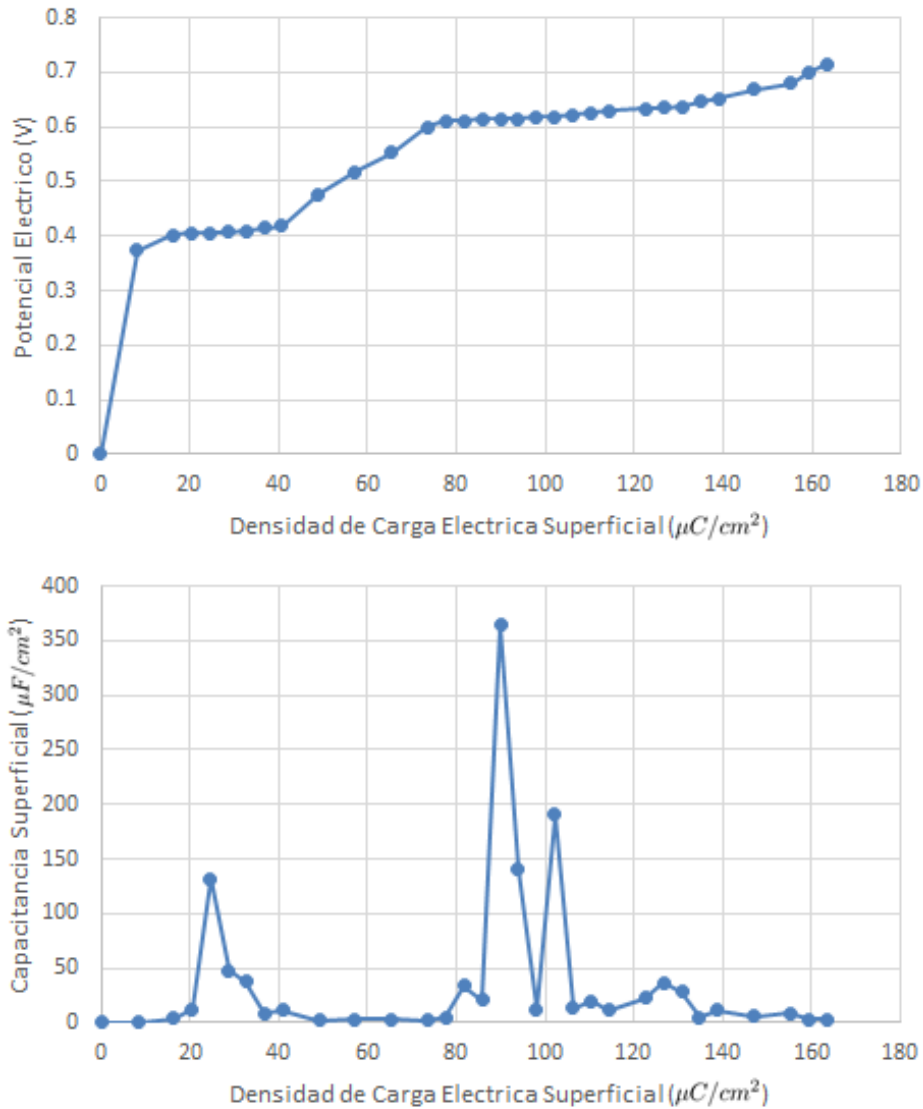


Figura 22: La figura muestra el comportamiento y valores simulados del potencial eléctrico (arriba) y la capacitancia superficial (abajo) cuando varía la densidad de carga eléctrica superficial impuesta en los extremos del nanoporo tubular. Esta tabla es la misma que en el caso anterior pero incluyendo las unidades respectivas.

En las figuras anteriores se aprecian valores simulados mas grandes en la capacitancia que en el caso anterior cuando la permitividad eléctrica relativa tenia un valor de 80. Este aumento es debido a una disminución en el valor de la permitividad eléctrica relativa, que a su vez es uno de los parámetros que determinan el valor de la variable γ , expuesta anteriormente.

$$\gamma = \frac{1}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0 d} \frac{e^2}{k_B T}$$

A partir de la ecuación anterior se puede notar algo importante. El valor de la variable γ que interviene en el modelo depende de forma inversamente proporcional con la permitividad eléctrica relativa, el diámetro de los iones que componen el líquido iónico y la temperatura (Anexo C). Si cualquiera de estos valores aumenta, el valor de la variable disminuye, y viceversa. Cuando la permitividad eléctrica relativa tiene un valor de 80, el valor de γ es relativamente baja y los valores de la capacitancia adimensional son bajos. En cambio, cuando el valor de la permitividad eléctrica relativa es de 16, el valor de la variable γ es relativamente alto y los valores de la capacitancia adimensional son comparativamente más altos.

12.1.2. Nanoporo con un diámetro igual al doble del diámetro de los iones

Ahora se muestran los casos de dos líquidos iónicos distintos, uno con una permitividad eléctrica relativa de 80 (primer caso) y otro con una permitividad eléctrica relativa de 16 (segundo caso). Considerando el resto de parámetros como temperatura y diámetro de las partículas del líquido iónico con valores constantes de $300K$ y $0,7$ nm respectivamente.

Para el primer caso, al aplicar el modelo de simulación obtenemos una serie de valores entre el potencial eléctrico adimensional, capacitancia adimensional y la carga impuesta adimensional en los nanoporos tubulares.

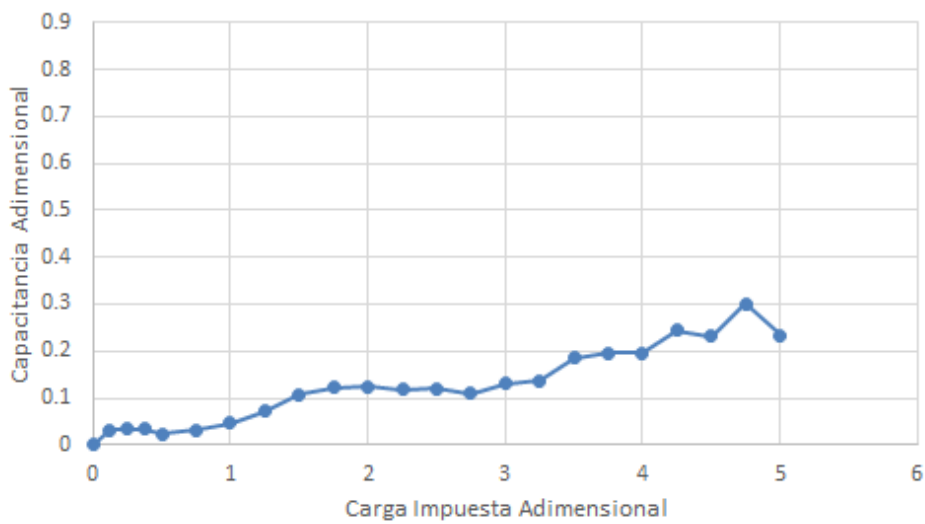
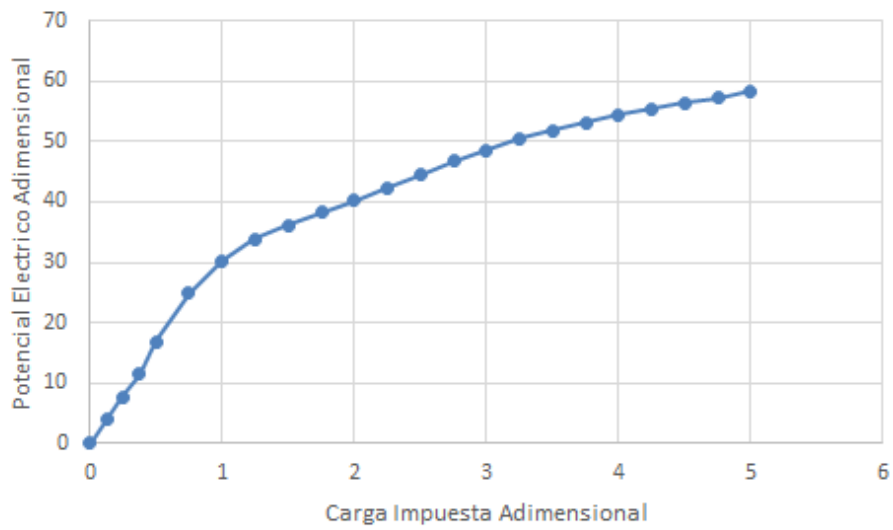


Figura 23: La figura muestra el comportamiento del potencial eléctrico adimensional (arriba) y la capacitancia adimensional (abajo) cuando varía la carga impuesta adimensional en los extremos del nanoporo. Habiendo usado el primer modelo, para una permitividad eléctrica relativa de 80, cuando el diámetro del nanoporo tubular es igual al doble del diámetro de las partículas que componen el líquido iónico .

En la figura 23 se observa que los valores del potencial eléctrico adimensional son mayores que cuando el diámetro del nanoporo tubular es igual al diámetro de las partículas que componen el líquido iónico. Esto se debe principalmente a que el área de contacto entre las partículas que componen el líquido iónico y la superficie de los nanoporos es mayor, por lo que existe una mayor cantidad de carga impuesta adimensional que interactúa con los iones .

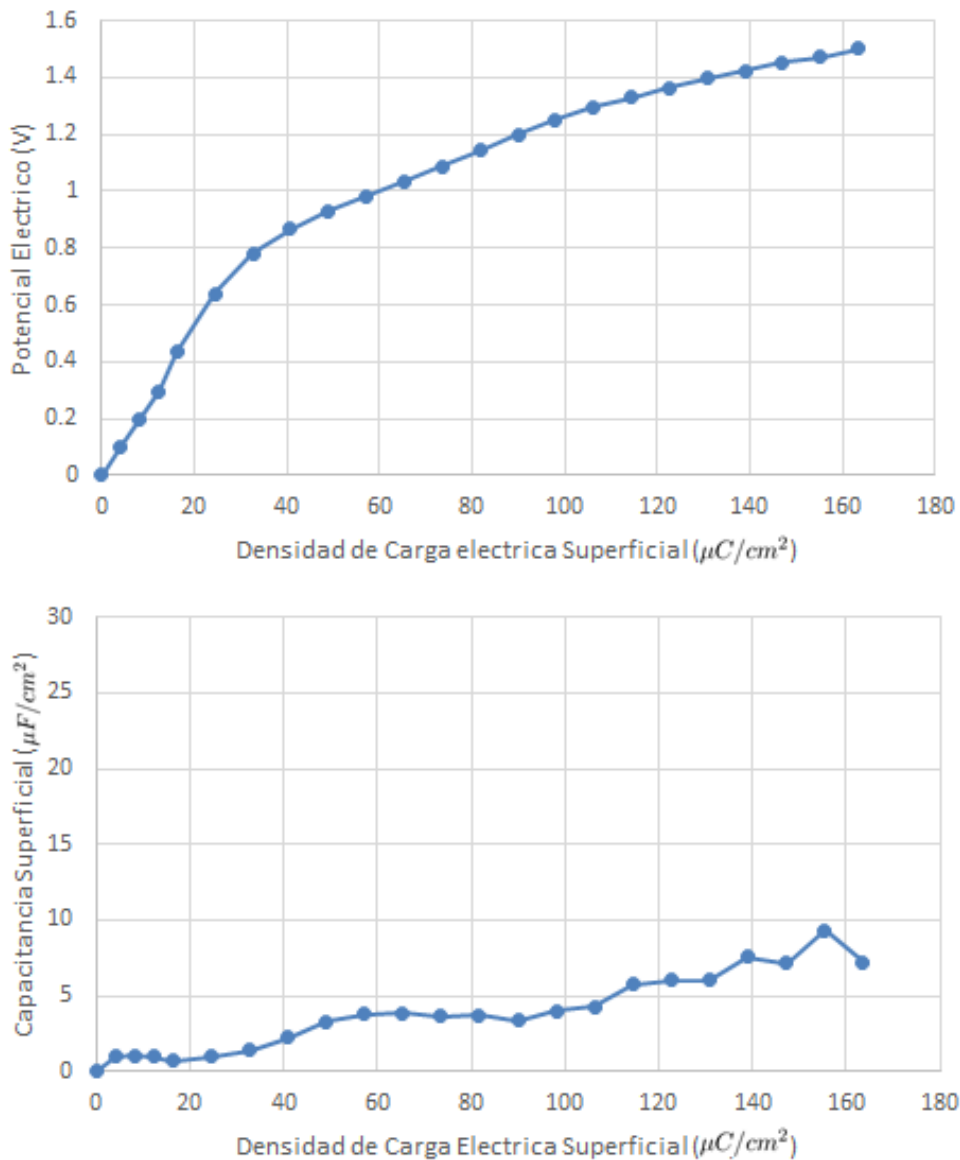


Figura 24: La figura muestra el comportamiento y los valores del potencial eléctrico (arriba) y la capacitancia superficial (abajo) cuando varía la densidad de carga eléctrica superficial en los extremos del nanoporo. Esta tabla es la misma que la anterior pero incluyendo las unidades respectivas y para una permitividad eléctrica relativa de 80

En la figura 24 vemos como el potencial eléctrico experimenta aumentos que van disminuyendo a medida que aumentamos el valor de la densidad de carga eléctrica superficial impuesta en los extremos del nanoporo tubular, pero son valores mayores comparados con un nanoporo tubular con un diámetro igual al de las partículas que componen el líquido iónico. Con respecto a la capacitancia, esta aumenta con un ritmo muy lento y con valores menores que cuando el diámetro del nanoporo tubular es igual al diámetro de las partículas que componen el líquido iónico.

Para el segundo caso, al aplicar el modelo de simulación obtenemos una serie de valores entre el potencial eléctrico adimensional, la capacitancia adimensional y la carga impuesta en los nanoporos.

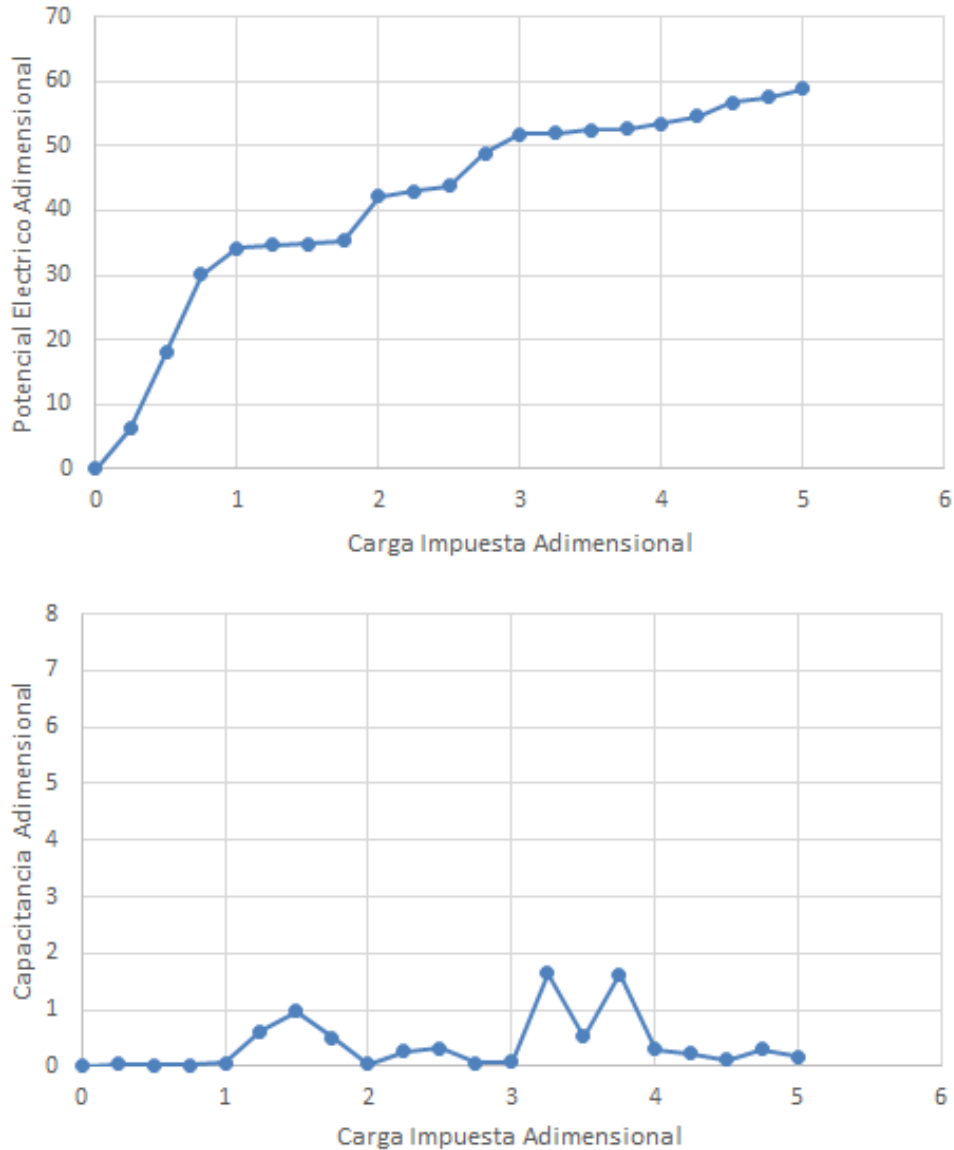


Figura 25: La figura muestra el comportamiento del potencial eléctrico adimensional (arriba) y la capacitancia adimensional (abajo) cuando varía la carga impuesta adimensional en los extremos del nanoporo. Habiendo usado el primer modelo, para una permitividad eléctrica relativa de 16, cuando el diámetro del nanoporo tubular es igual al doble del diámetro de las partículas que componen el líquido iónico.

En la figura 25 podemos notar que los valores del potencial eléctrico adimensional son mayores

que cuando el diámetro del nanoporo tubular es igual al diámetro de las partículas que componen el líquido iónico. Además los valores de la capacitancia adimensional tienen picos poco pronunciados.

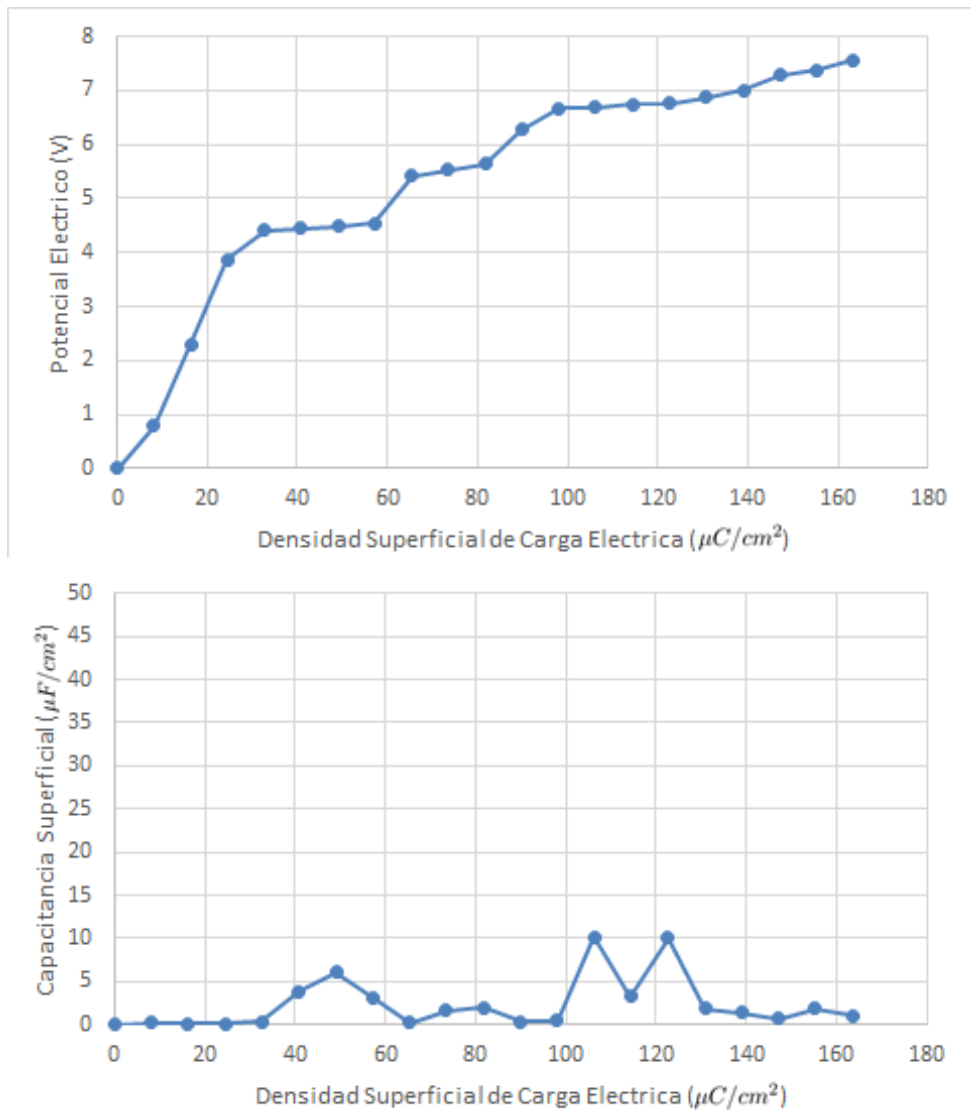


Figura 26: La figura muestra el comportamiento y los valores del potencial eléctrico (arriba) y la capacitancia superficial (abajo) cuando varía la densidad de carga eléctrica superficial en los extremos del nanoporo. Esta tabla es igual que la anterior pero incluyendo las unidades respectivas y para una permitividad eléctrica relativa de 16.

La figura 26 muestra que los valores del potencial eléctrico son mayores que cuando el diámetro del nanoporo tubular es igual al diámetro de los iones y los valores de la capacitancia son relativamente bajos. Estos resultados están de acuerdo con los resultados experimentales, cuanto mayor sea el diámetro del nanoporo tubular, menor será el valor de la capacitancia adimensional.

12.1.3. Nanoporo con un diámetro igual al triple del diámetro de los iones

Ahora se muestran los casos de dos líquidos iónicos distintos, uno con una permitividad eléctrica adimensional de 80 (primer caso) y otro con una permitividad eléctrica de 16 (segundo caso). Considerando el resto de parámetros como temperatura y diámetro de los iones con valores constantes de $300K$ y $0.7nm$ respectivamente. Para el primer caso, al aplicar el modelo de simulación obtenemos una serie de valores entre el potencial eléctrico adimensional, la capacitancia adimensional y la carga impuesta adimensional en el nanoporo tubular.

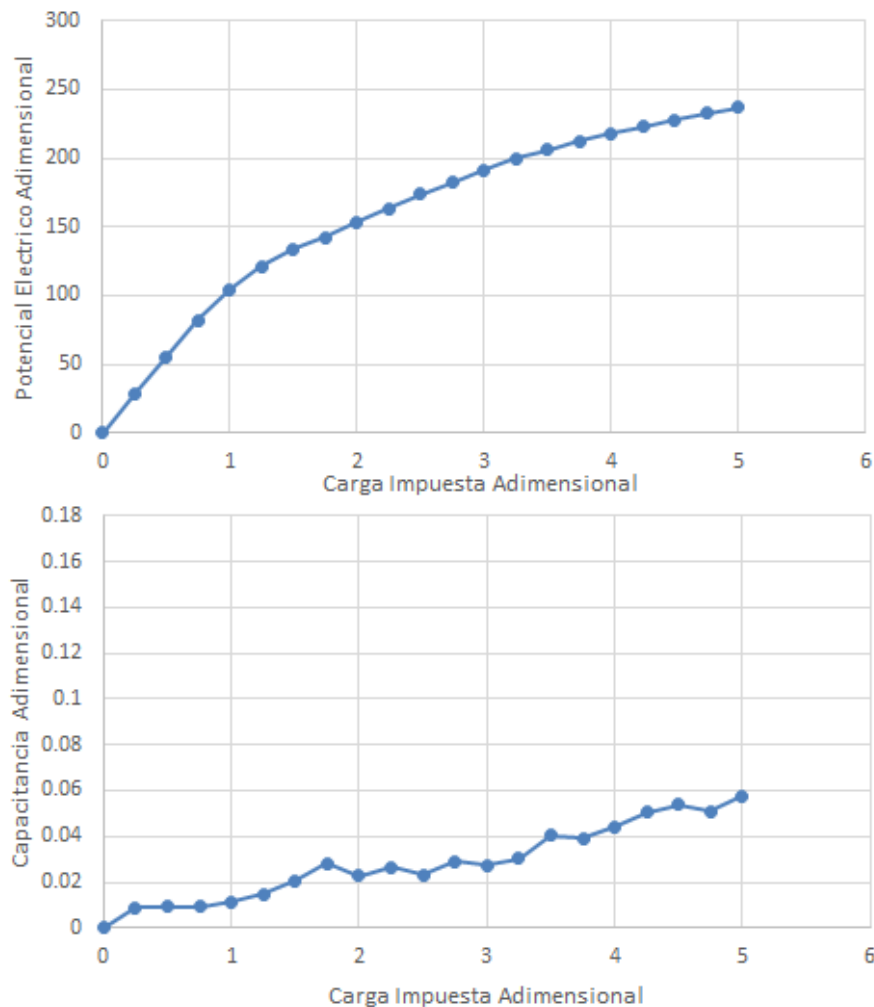


Figura 27: La figura muestra el comportamiento del potencial eléctrico adimensional (arriba) y la capacitancia adimensional (abajo) al variar la carga impuesta adimensional en los extremos del nanoporo. Los valores de la capacitancia son bajos comparado con los valores que se obtienen con un nanoporo de un diámetro igual al diámetro de los iones que componen el líquido iónico. Pero el valor del potencial eléctrico adimensional es mayor. Habiendo usado el primer modelo, para una permitividad eléctrica relativa de 80, cuando el diámetro del nanoporo tubular es igual al triple del diámetro de los iones.

En la figura 27 se observan valores muy bajos para la capacitancia adimensional, pero mas altos para el potencial eléctrico adimensional en comparación de las simulaciones con un diámetro de nanoporo tubular menor.

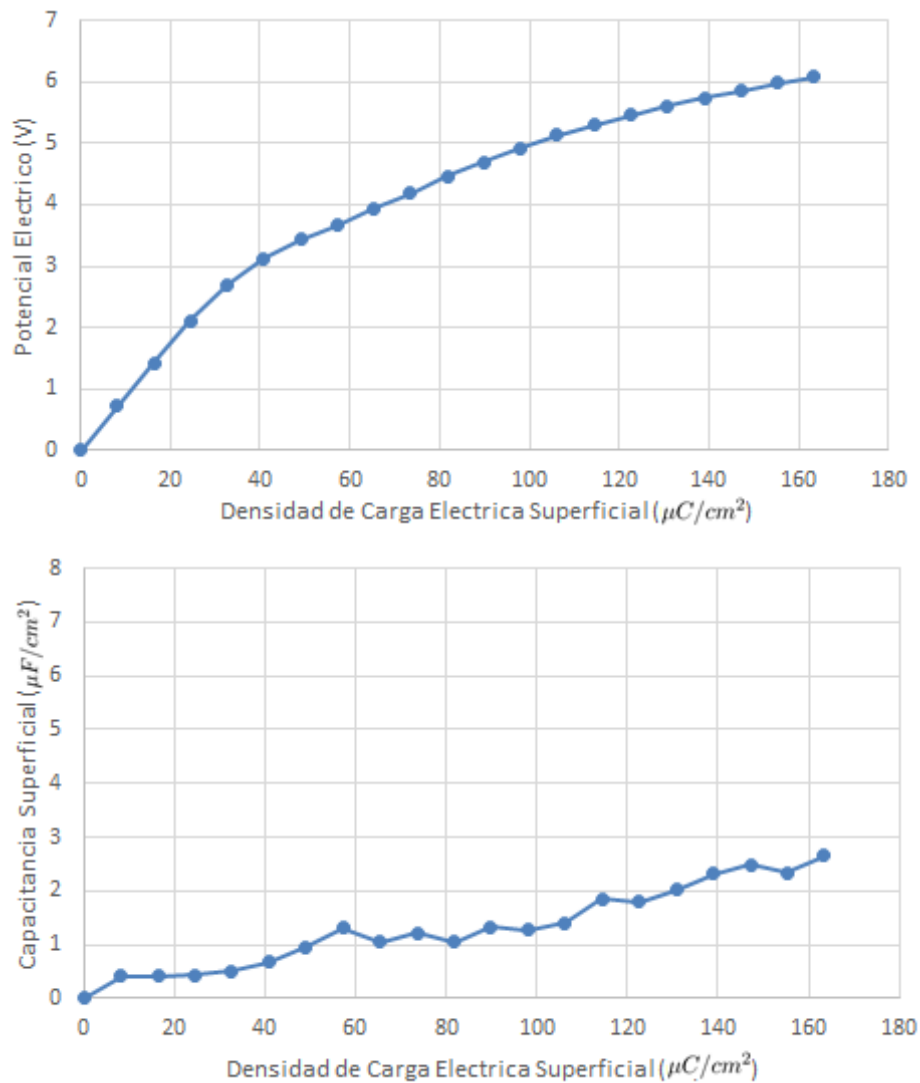


Figura 28: La figura muestra el comportamiento y los valores del potencial eléctrico (arriba) y la capacitancia superficial (abajo) cuando varía la densidad de carga eléctrica superficial en los extremos del nanoporo tubular. Los valores de la capacitancia son muy bajos comparado con los valores que se obtienen con un nanoporo tubular de un diámetro igual al diámetro de los iones que componen el ión líquido. Pero el valor del potencial eléctrico es mayor. Esta tabla es la misma que la anterior, pero con las unidades respectivas y para una permitividad eléctrica relativa de 80.

En la figura 28 vemos como el potencial eléctrico experimenta aumentos que van disminuyendo a medida que aumentamos el valor de la densidad de carga eléctrica superficial impuesta en los extremos del nanoporo tubular, pero con valores mas grandes en comparación a nanoporos tubulares de

menor diámetro. Con respecto a la capacitancia, esta aumenta con un ritmo muy lento, tomando valores relativamente bajos. Para el segundo caso, al aplicar el modelo de simulación obtenemos una serie de valores entre el potencial eléctrico adimensional, la capacitancia adimensional y la carga impuesta adimensional en los nanoporos.

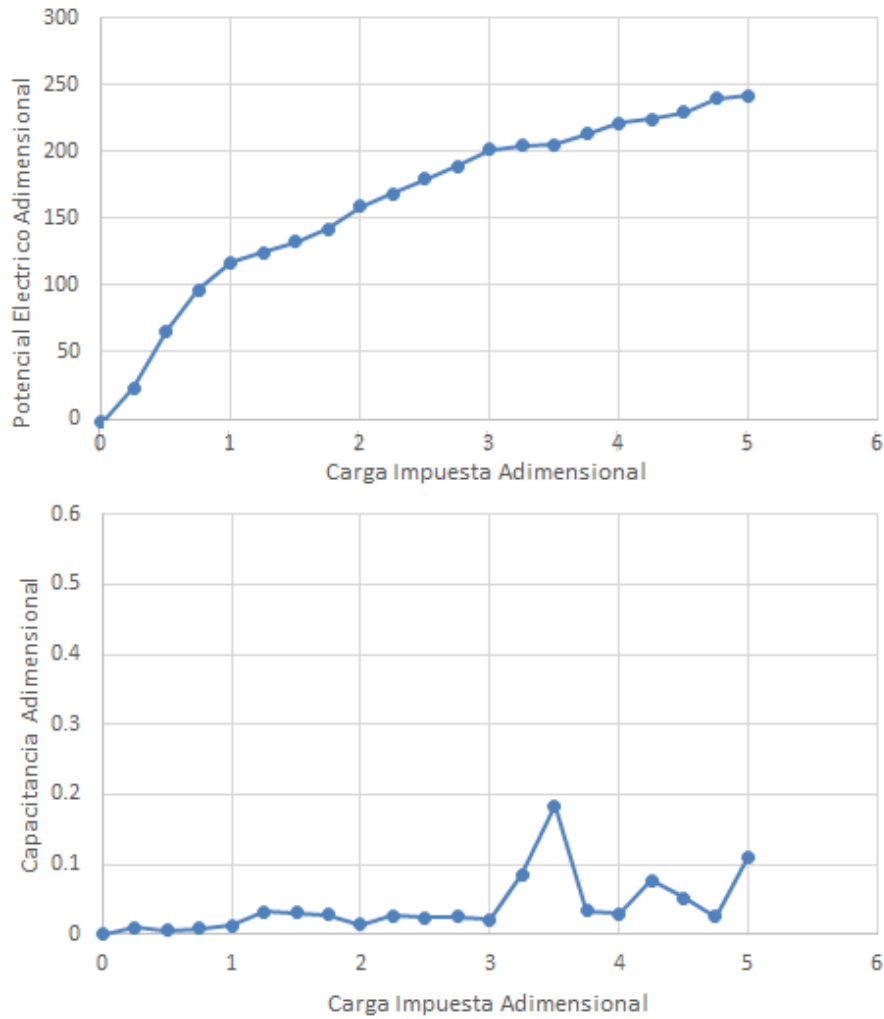


Figura 29: Comportamiento del potencial eléctrico adimensional (arriba) y la capacitancia adimensional (abajo) cuando varía la carga impuesta adimensional en los extremos del nanoporo tubular. Al igual que en el caso anterior, los valores de la capacitancia adimensional son bajos comparado con los valores que se obtienen con un nanoporo de un diámetro igual al diámetro de las partículas que componen el ión líquido. Pero el valor del potencial eléctrico adimensional es mayor. Habiendo usado el primer modelo, para una permitividad eléctrica relativa de 16, cuando el diámetro del nanoporo tubular es igual al triple del diámetro de los iones.

En la figura 29 tenemos un resultado similar al anterior, el valor de la capacitancia adimensional no es afectada apreciablemente por el valor de la variable de γ . Además podemos considerar que

la simulación replica los resultados experimentales, pues al aumentar el valor del diámetro del nanoporo tubular con relación al diámetro de los iones que componen el líquido iónico, el valor de la capacitancia adimensional disminuye.

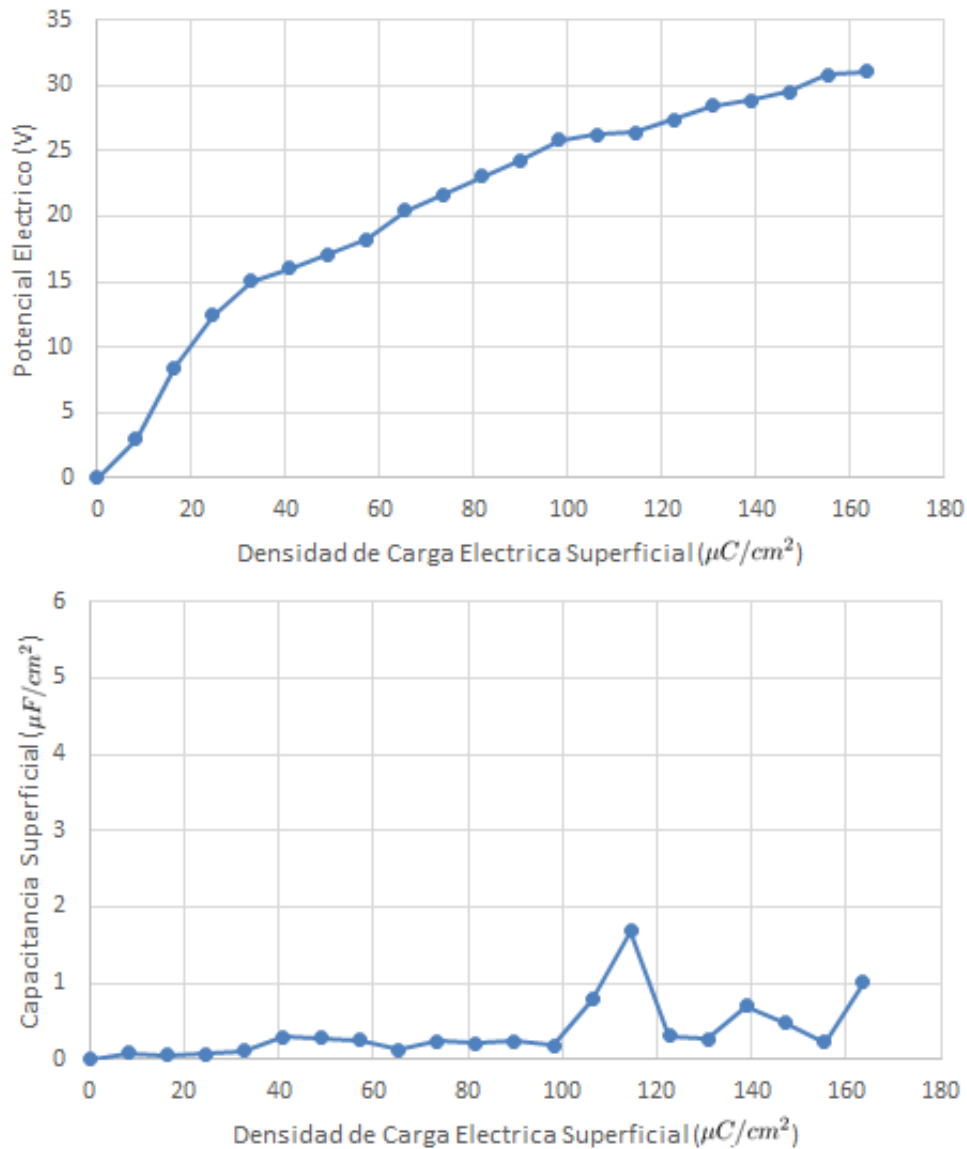


Figura 30: La figura muestra el comportamiento y el valor del potencial eléctrico (arriba) y la capacitancia superficial (abajo) cuando varía la densidad de carga eléctrica superficial en los extremos del nanoporo tubular para una permitividad eléctrica relativa de 16. Los valores de la capacitancia son muy bajos pero el valor del potencial eléctrico es mayor.

En la figura 30 vemos como el potencial eléctrico experimenta aumentos que van disminuyendo a medida que aumentamos el valor de la densidad de carga eléctrica superficial impuesta en los extremos del nanoporo tubular. Con respecto a la capacitancia, esta aumenta con un ritmo muy

lento, tomando valores relativamente bajos. Finalmente comparamos los potenciales electricos para todos los diámetros de nanoporo en el primer modelo.

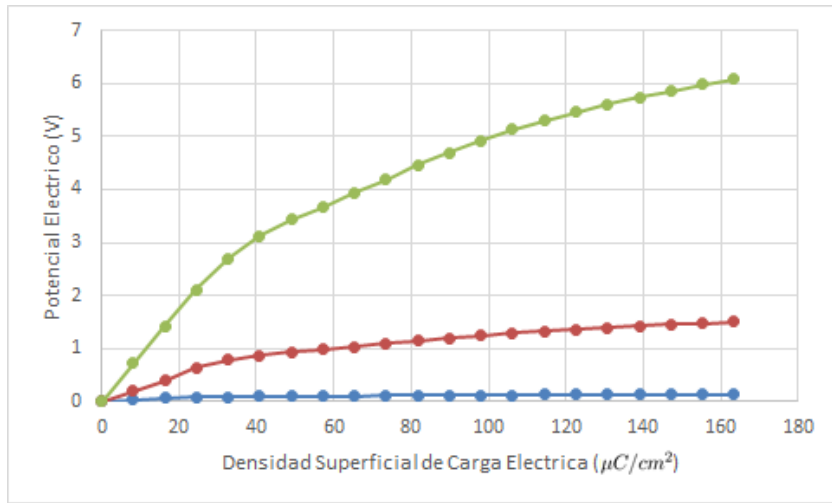


Figura 31: Comparación entre los potencial electricos para nanoporos tubulares de 0.7nm (azul), 1.4nm (rojo) y 2.1nm (verde); considerando una permitividad electrica de 80.

En la figura 31 se muestra una comparación entre los valores obtenidos para los distintos diámetros con una permitividad electrica de 80.

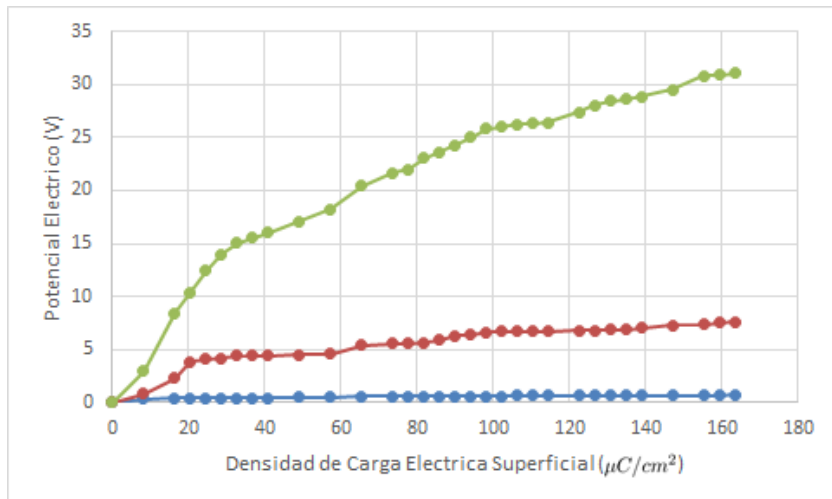


Figura 32: Comparación entre los potencial electricos para nanoporos tubulares de 0.7nm (azul), 1.4nm (rojo) y 2.1nm (verde); considerando una permitividad electrica de 16.

En la figura 32 se muestra una comparación entre los valores obtenidos para los distintos diámetros con una permitividad electrica de 16. Vemos que los valores mas altos son para un valor de permitividad eléctrica relativa pequeño.

12.2. Simulación con el Segundo Modelo

En esta parte se estudia el comportamiento de la capacitancia y el potencial eléctrico para el caso en el que las cargas impuestas en los electrodos se distribuyen en todas las paredes del nanoporo.

Primero se aplicó el modelo de simulación para estudiar los efectos que tiene la longitud del nanoporo tubular en el potencial eléctrico. Para ello se fijaron como constantes los siguientes parámetros; la temperatura tomó un valor de $300K$, el diámetro de los iones tomó un valor de $1,0\text{ nm}$, al igual que el diámetro del nanoporo tubular, con un valor para la carga impuesta adimensional de $1,0$ en los extremos del nanoporo y por último el valor de la permitividad eléctrica adimensional tomó un valor de 55 . Dejando como únicas variables en el modelo al potencial eléctrico adimensional y la longitud del nanoporo tubular.

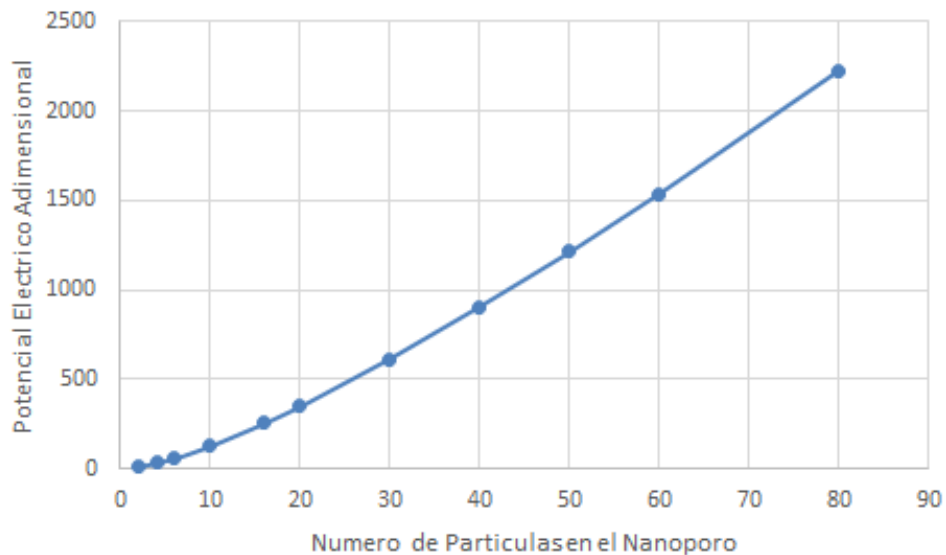


Figura 33: La figura muestra la variación del potencial eléctrico adimensional a medida que aumentamos la longitud del nanoporo tubular.

La figura 33 nos muestra el comportamiento del potencial eléctrico a medida que variamos la longitud del nanoporo tubular. Se observa que principalmente existe un comportamiento lineal entre el potencial eléctrico y la longitud del nanoporo, debido a que el valor de la longitud del nanoporo y el valor del área del nanoporo son directamente proporcionales, y a mayor sea el área de contacto entre el líquido iónico y la superficie del nanoporo, mayor será el valor del potencial eléctrico.

En las siguientes tablas se mostrará solamente los resultados de las cargas adimensionales de la mitad del nanoporo tubular debido a la simetría del modelo.

Ahora con el fin de evaluar los valores promedio de las cargas eléctricas en el modelo de simulación cuando, se aplica el programa a un modelo compuesto por un nanoporo tubular de un diámetro igual al diámetro de los iones que componen el nanoporo, con una longitud igual al diámetro de 40 iones, y contendrá 20 iones con carga positiva (de valor +1) y 20 iones con carga negativa (de valor -1), con un valor para la permitividad eléctrica relativa de 80.

Los resultados que se muestran a continuación corresponden a valores de carga impuesta adimensional que aumentan progresivamente, esto servirá para ilustrar de la forma mas sencilla el comportamiento de las cargas al interior del nanoporo tubular. Es necesario recordar que todos los resultados que se presentan corresponden a sistemas que han alcanzado el equilibrio.

En estas tablas se observa como aumenta la carga promedio adimensional a lo largo del nanoporo tubular, al aumentar la carga impuesta adimensional en los extremos.

Carga impuesta adimensional $Q=0$: Cuando la carga impuesta adimensional es cero. La carga promedio adimensional de cada nodo es prácticamente cero. Debido a que la energía cinética promedio de los iones es grande comparada con la energía eléctrica entre los iones.

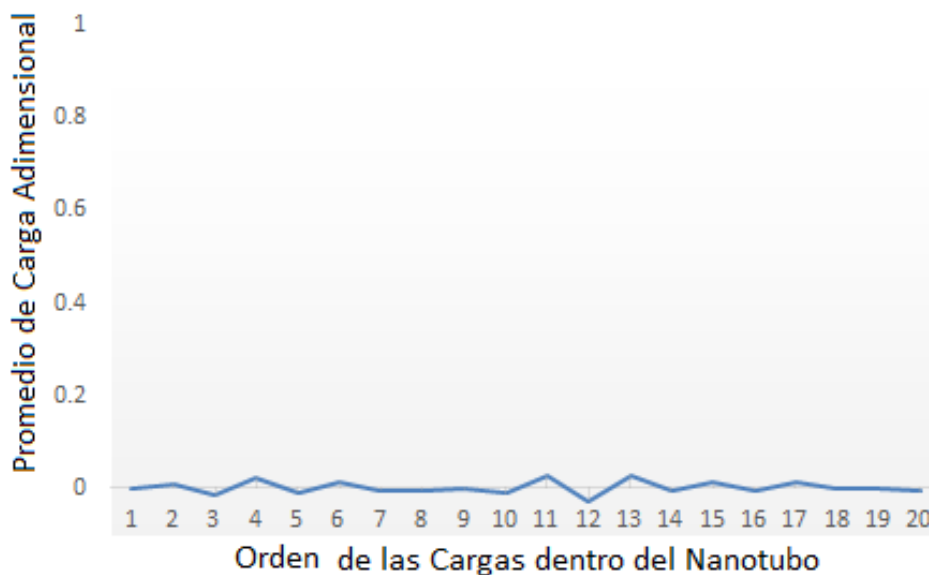


Figura 34: Promedio de carga eléctrica adimensional, obtenida a partir del programa en lenguaje C++ para una carga impuesta adimensional nula. Todos los valores son muy cercanos a cero.

En la figura 34 se muestra la variación promedio de la carga eléctrica adimensional desde la posición 1 hasta la posición 20, para un nanoporo tubular del lado positivo del modelo. En este nanoporo tubular las cargas impuestas están ubicadas a lo largo de las paredes del mismo y al extremo del nanoporo tubular del lado positivo del modelo.

Carga impuesta adimensional $Q=0.01$: cuando aumentamos la carga impuesta adimensional, la carga promedio adimensional a lo largo de todo el nanoporo tubular aumenta. Esto se debe a que las cargas impuestas en la superficie del nanoporo están cerca de todas las partículas del líquido iónico, lo que ocasiona que la energía eléctrica en este segundo modelo sea mucho mayor a la energía eléctrica del primer modelo, entonces la energía eléctrica en la mayoría de los casos en el segundo modelo, supera a la energía cinética de las partículas eléctricas que componen el líquido iónico.



Figura 35: Promedio de carga eléctrica adimensional a lo largo del nanotubo. Los valores son ligeramente mayores que en el caso anterior debido a la presencia de la carga impuesta en las paredes del nanoporo tubular.

En la figura 35 se evidencia un ligero aumento en los valores de la carga promedio adimensional a lo largo de todo el nanoporo.

Carga impuesta adimensional $Q=0.05$: Ahora el incremento en la carga eléctrica adimen-

sional a lo largo del nanoporo tubular es mayor que en el caso anterior, debido al aumento en las cargas impuestas en las paredes del nanoporo.



Figura 36: Promedio de carga eléctrica adimensional, obtenida a partir del programa en lenguaje C++ para una carga eléctrica adimensional de 0.05. Se observa que los valores obtenidos son mayores que en el caso anterior.

En la figura 36 se evidencia un aumento mayor en los valores de la carga promedio adimensional a lo largo de todo el nanoporo.

Carga impuesta adimensional $Q=0.2$: Ahora el valor de la carga eléctrica adimensional a lo largo del nanoporo tubular es mucho mayor. A medida que aumentemos el valor de la carga impuesta en las paredes del nanoporo, mayor será el valor del promedio de carga eléctrica adimensional a lo largo del mismo, aproximándose al valor de 1.

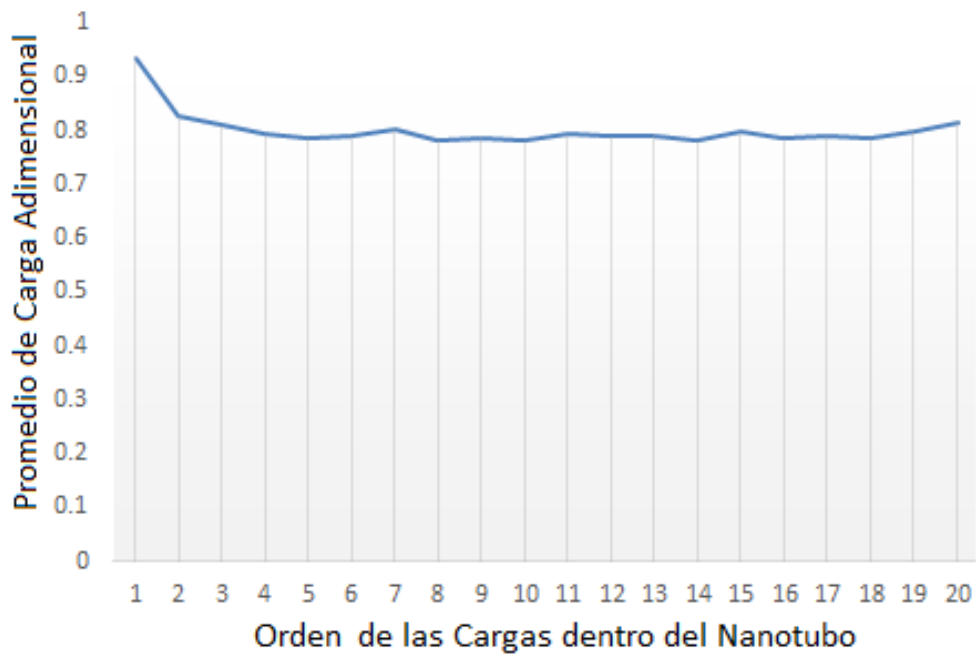


Figura 37: Carga eléctrica adimensional a lo largo del nanoporo tubular, obtenida a partir del programa en lenguaje C++ para una carga impuesta adimensional de 0.2. Se observa un mayor valor del promedio de carga eléctrica adimensional a lo largo de todo el nanoporo.

En la figura 37 se evidencia un aumento mucho mayor en los valores de la carga promedio adimensional a lo largo de todo el nanoporo, teniendo como límite superior el valor de 1.

Carga impuesta adimensional $Q=0.3$: Para este caso, los valores del promedio de carga eléctrica adimensional a lo largo de todo el nanoporo tubular ya han alcanzado valores muy próximos a la unidad. A partir de ahora los aumentos en el potencial eléctrico derivados de mas aumentos del la carga impuesta en las paredes del nanoporo serán cada vez mas pequeñas.

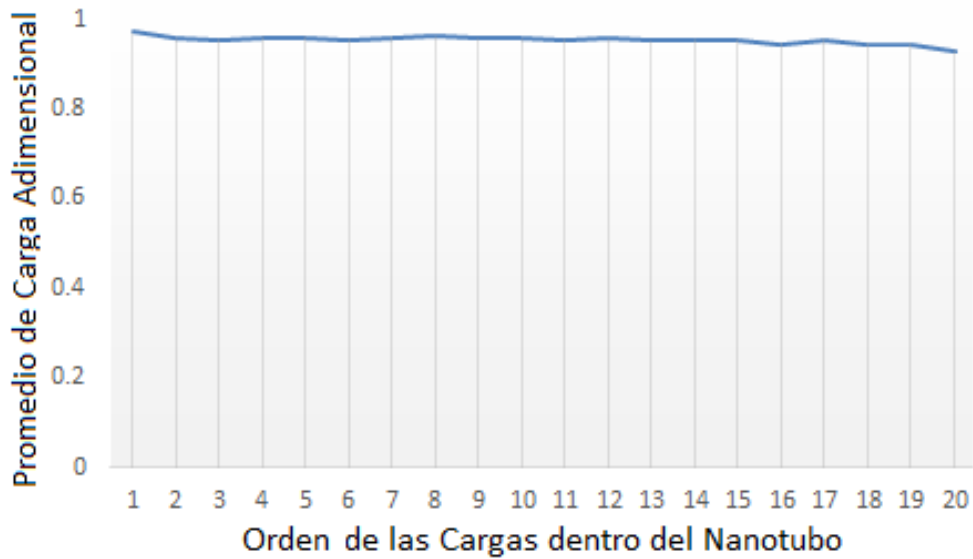


Figura 38: Promedio de carga eléctrica adimensional a lo largo del nanoporo tubular, obtenida a partir del programa en lenguaje C++ para una carga impuesta adimensional de 0.3. los valores son bastante proximos a la unidad.

En la figura 38, los resultados revelan que los incrementos en el promedio de carga eléctrica adimensional a lo largo de todo el nanoporo se incrementan rapidamente con la carga impuesta en las paredes. Pero una vez que estos valores se aproximan a la unidad ya no podemos esperar mayores incrementos, debido a que la carga adimensional máxima es la unidad.

Ahora se muestran los resultados producidos al aplicar el algoritmo de simulación a nanoporos tubulares de distinto diámetro.

12.2.1. Nanoporo con un diametro igual al diametro de los iones

Ahora se muestran los casos de dos líquidos iónicos distintos, uno con una permitividad eléctrica relativa de 55 (primer caso) y otro con una permitividad eléctrica relativa de 16 (segundo caso). Considerando el resto de parámetros como temperatura y diámetro de las partículas del líquido iónico con valores constantes de $300K$ y $1.0nm$ respectivamente.

Para el primer caso, al aplicar el modelo de simulación obtenemos una serie de valores entre el potencial eléctrico adimensional y la capacitancia adimensional al variar la carga impuesta adimensional en el nanoporo tubular.

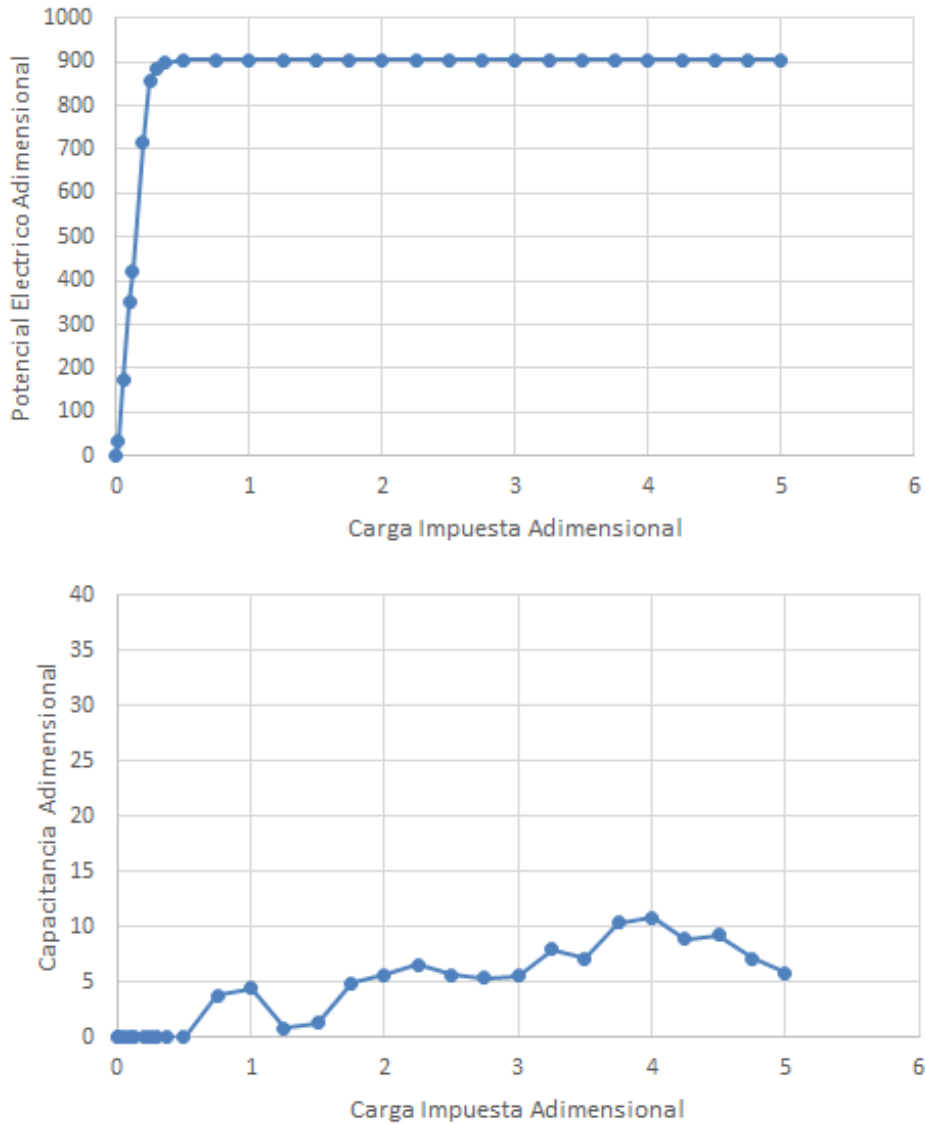


Figura 39: Para el primer caso, la tabla muestra el comportamiento del potencial eléctrico adimensional (arriba) y la capacitancia adimensional (abajo) cuando varía la carga impuesta adimensional en los extremos del nanoporo tubular. Habiendo usado el segundo modelo, para una permitividad eléctrica relativa de 55, cuando el diámetro del nanoporo tubular es igual al diámetro de las partículas que componen el líquido iónico.

En la figura 39 se ve como los valores del potencial eléctrico adimensional es mucho mayor comparado con el modelo anterior, además de que alcanza rápidamente un nivel máximo. Pero la capacitancia adimensional no presenta los altos valores vistos en el modelo anterior.

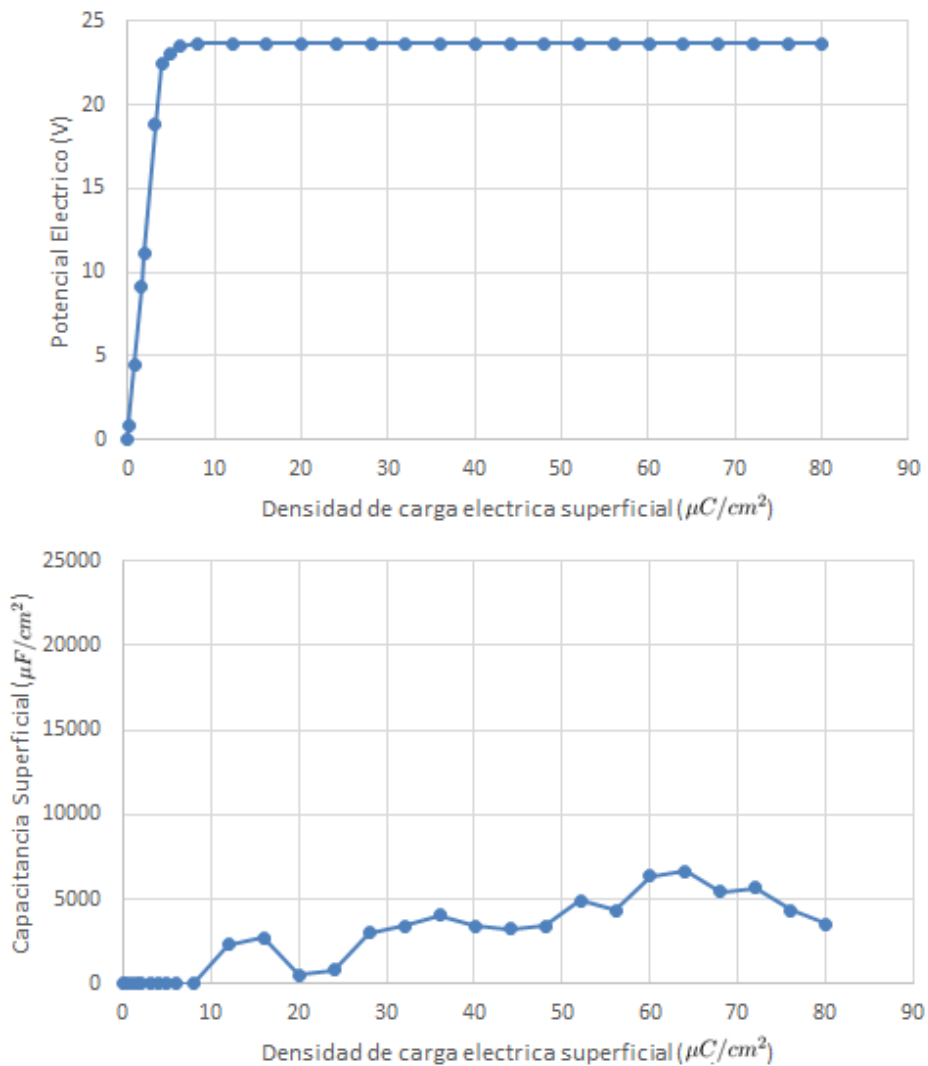


Figura 40: Para el primer caso, la tabla muestra el comportamiento y los valores del potencial eléctrico (arriba) y la capacitancia superficial (abajo) cuando varia la densidad de carga eléctrica superficial en los extremos del nanoporo tubular. Esta tabla es la misma que la anterior, pero incluyendo las unidades respectivas y para una permitividad eléctrica relativa de 55.

En la figura 40 vemos como el potencial eléctrico experimenta un aumento enorme y muy rápido para luego mantenerse constante a medida que aumentamos el valor de la carga eléctrica superficial impuesta en los extremos del nanoporo tubular. Con respecto a la capacitancia, esta aumenta con un ritmo muy lento, pero tomando valores mucho mas altos que en el modelo anterior

Para el segundo caso, al aplicar el modelo de simulación obtenemos una serie de valores entre el potencial eléctrico adimensional, la capacitancia adimensional y la carga impuesta adimensional en los nanoporo tubular.

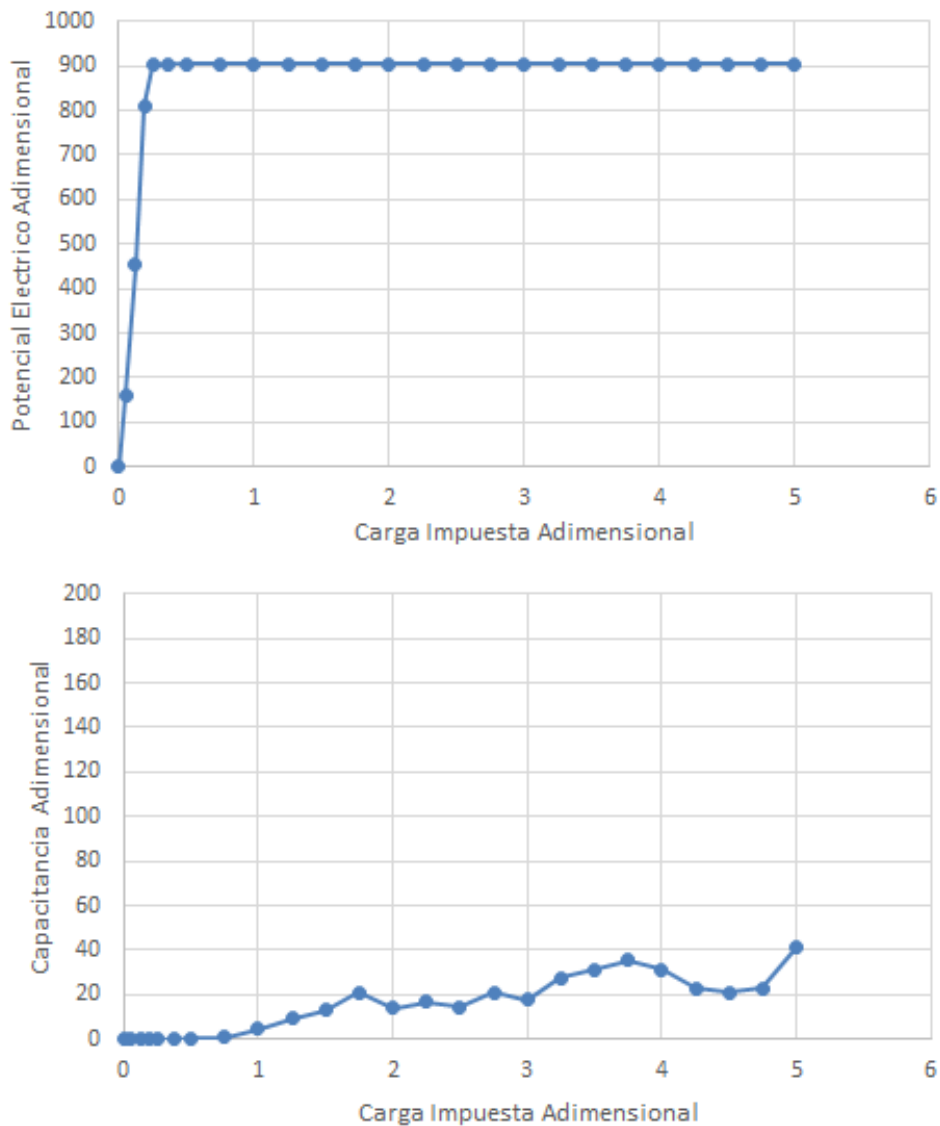


Figura 41: Para el segundo caso, la tabla muestra el comportamiento del potencial eléctrico adimensional (arriba) y la capacitancia adimensional (abajo) cuando varía la carga impuesta adimensional en los extremos del nanoporo tubular. Habiendo usado el segundo modelo, para una permitividad eléctrica relativa de 16, cuando el diámetro del nanoporo tubular es igual al diámetro de las partículas que componen el líquido iónico.

En la figura 41 se observa que el potencial eléctrico adimensional es prácticamente el mismo que para el caso anterior. Y la capacitancia adimensional es similar al caso anterior, por lo que la diferencia de permitividades eléctricas relativas no representa una diferencia apreciable entre ambos.

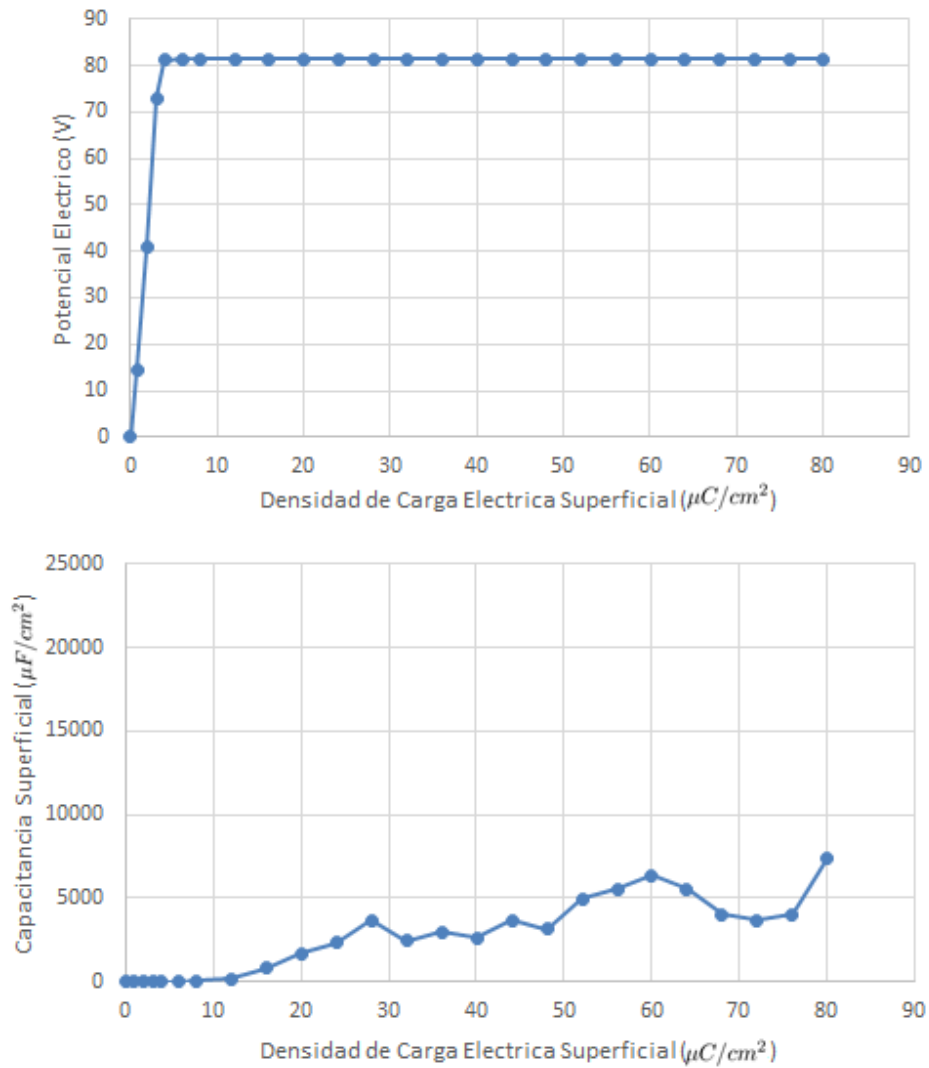


Figura 42: Para el segundo caso, la tabla muestra el comportamiento del potencial eléctrico (arriba) y la capacitancia superficial (abajo) cuando varía la densidad de carga eléctrica impuesta en los extremos del nanoporo tubular. Esta tabla es igual a la anterior pero incluyendo las unidades respectivas y para una permitividad eléctrica relativa de 16.

En la figura 42 vemos como el potencial eléctrico experimenta un aumento enorme y muy rápido para luego mantenerse constante a medida que aumentamos el valor de la carga eléctrica superficial impuesta en los extremos del nanoporo tubular, pero con valores mas altos que cuando la permitividad eléctrica relativa es de 55. Con respecto a la capacitancia, esta aumenta con un ritmo muy lento, pero tomando valores mucho mas altos que en el modelo anterior

El valor de la permitividad eléctrica relativa es importante para el potencial eléctrico. Tal como en la teoría, a menor permitividad eléctrica relativa, mayor potencial eléctrico.

12.2.2. Nanoporo con un diámetro igual al doble del diámetro de los iones

Ahora se muestran los casos de dos líquidos iónicos distintos, uno con una permitividad eléctrica relativa de 55 (primer caso) y otro con una permitividad eléctrica relativa de 16 (segundo caso). Considerando el resto de parámetros como temperatura y diámetro de las partículas del líquido iónico con valores constantes de $300K$ y $0.7nm$ respectivamente. Para el primer caso, al aplicar el modelo de simulación obtenemos una serie de valores entre el potencial eléctrico adimensional, la capacitancia adimensional y la carga impuesta adimensional en el nanoporo tubular.

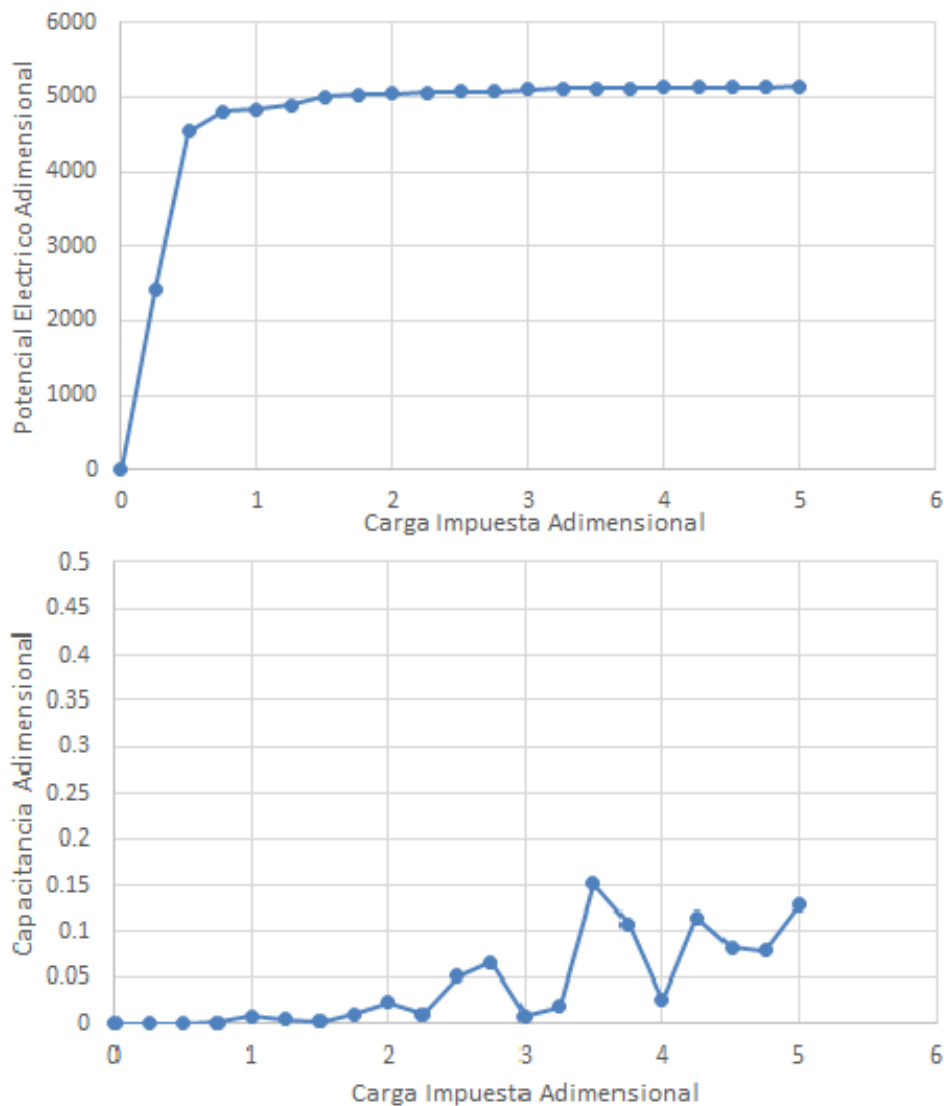


Figura 43: Para el primer caso, la tabla muestra el comportamiento del potencial eléctrico adimensional (arriba) y la capacitancia adimensional (abajo) cuando varía la carga impuesta adimensional en los extremos del nanoporo tubular. Habiendo usado el segundo modelo, para una permitividad eléctrica relativa de 55, cuando el diámetro del nanoporo tubular es igual al doble del diámetro de las partículas que componen el líquido iónico.

En la figura 43 anterior se ve como los valores del potencial eléctrico adimensional son mayores comparados con los valores obtenidos a partir de nanoporos de diámetros menores, debido a un aumento en la superficie de contacto entre los iones que componen el líquido iónico y las cargas impuestas en las paredes del nanoporo tubular. Pero la capacitancia adimensional no presenta los altos valores presentes en el modelo anterior. Estos resultados coinciden con los resultados experimentales, a mayor diámetro de los nanoporos tubulares, menor valor de la capacitancia.

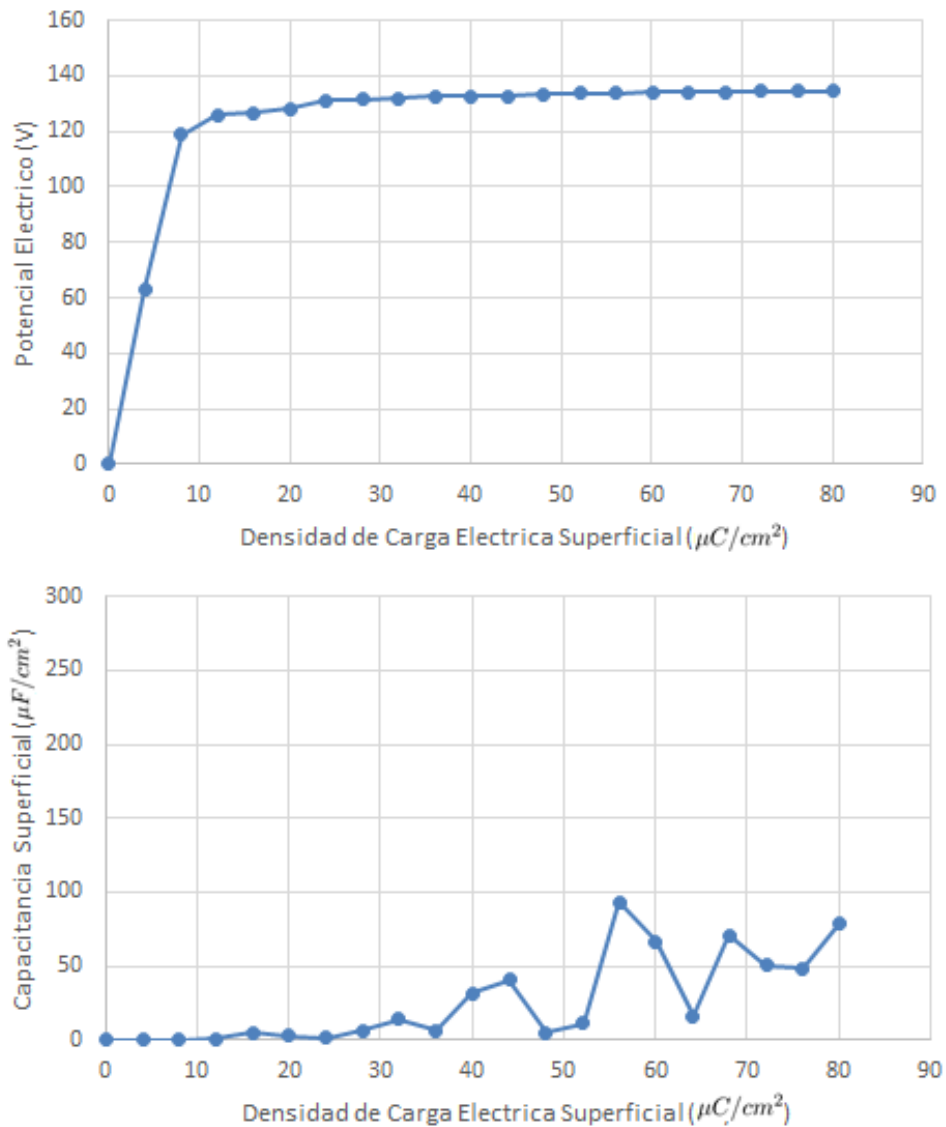


Figura 44: Para el primer caso, la tabla muestra el comportamiento y los valores del potencial eléctrico (arriba) y la capacitancia superficial (abajo) cuando varía la densidad de carga eléctrica superficial en los extremos del nanoporo tubular. Esta tabla es igual a la anterior, pero incluyendo las unidades respectivas y para una permitividad eléctrica relativa de 55.

En la figura 44 vemos como el potencial eléctrico experimenta un incremento muy rápido para luego mantenerse constante a medida que aumentamos el valor de la carga eléctrica superficial impuesta en los extremos del nanoporo tubular. Con respecto a la capacitancia, esta aumenta con un ritmo muy lento, tomando valores relativamente bajos comparados con nanoporos tubulares de diámetros menores. Para el segundo caso, al aplicar el modelo de simulación obtenemos una serie de valores entre el potencial eléctrico adimensional, capacitancia adimensional y la carga impuesta adimensional en el nanoporo tubular.

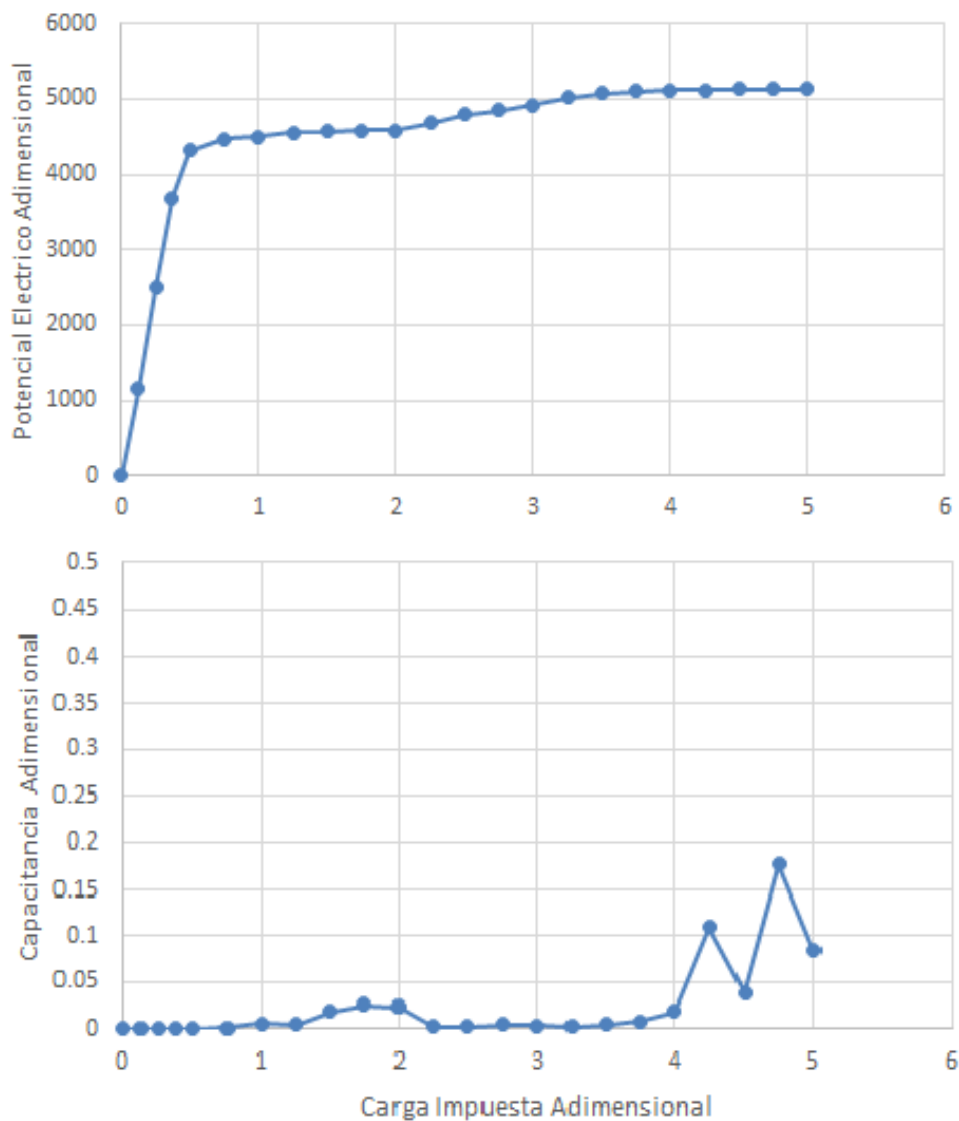


Figura 45: Para el segundo caso, la tabla muestra el comportamiento del potencial eléctrico adimensional (arriba) y la capacitancia adimensional (abajo) cuando varía la carga impuesta adimensional en los extremos del nanoporo tubular. Habiendo usado el segundo modelo, para una permitividad eléctrica relativa de 16, cuando el diámetro del nanoporo tubular es igual al doble del diámetro de las partículas que componen el líquido iónico.

En la figura 45 vemos que el comportamiento del potencial eléctrico adimensional y de la capacitancia adimensional es practicamente el mismo que en el caso anterior. Por lo que se puede decir que el valor de la permitividad eléctrica relativa no tiene importancia en estos valores adimensionales.

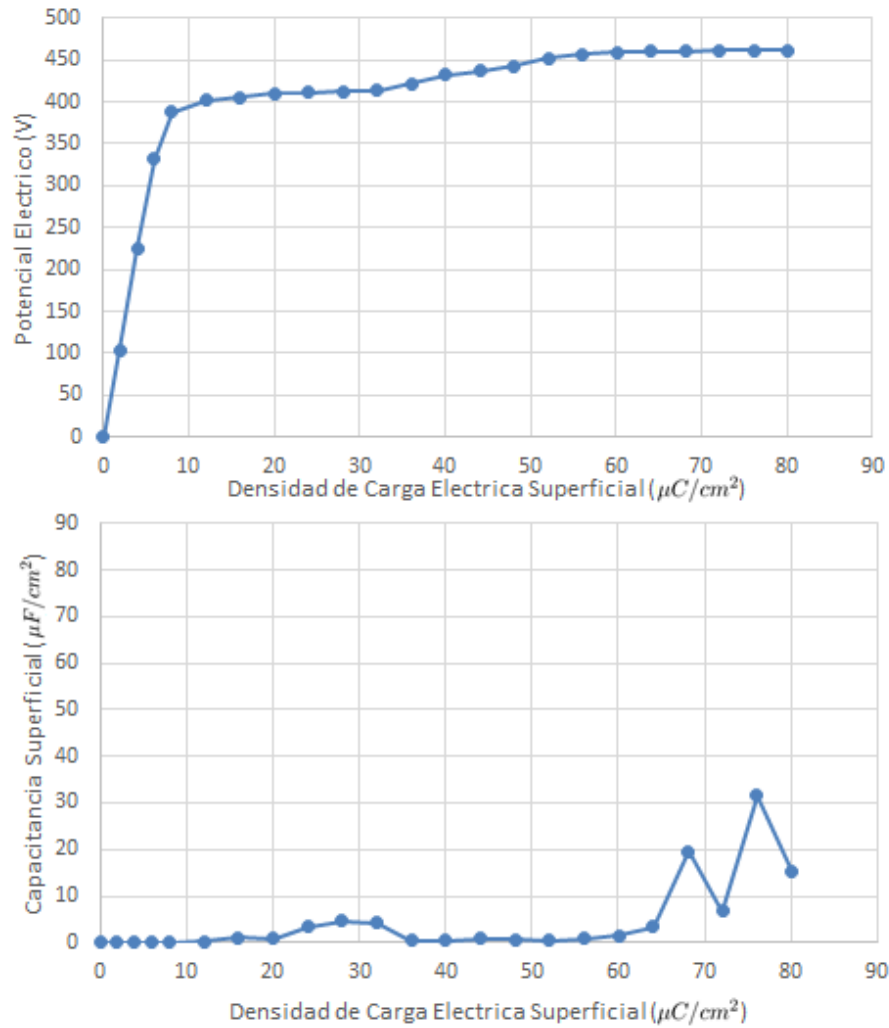


Figura 46: Para el segundo caso, la tabla muestra el comportamiento y los valores del potencial eléctrico (arriba) y la capacitancia superficial (abajo) cuando varia la densidad de carga eléctrica impuesta a ambos lados del nanoporo tubular. Esta tabla es igual a la anterior, pero incluyendo las unidades respectivas y para una permitividad eléctrica relativa de 16.

En la figura 46 vemos como el potencial eléctrico experimenta un aumento rapido para luego permanecer con altos valores a medida que aumentamos el valor de la carga eléctrica superficial impuesta a ambos lados del nanoporo tubular. Con respecto a la capacitancia, esta aumenta con un ritmo muy lento, comparado con nanoporos tubulares de diámetros menores.

12.2.3. Nanoporo con un diámetro igual al triple del diámetro de los iones

Ahora se muestran los casos de dos líquidos iónicos distintos, uno con una permitividad eléctrica relativa de 55 (primer caso) y otro con una permitividad eléctrica relativa de 16 (segundo caso). Considerando el resto de parámetros como temperatura y diámetro de las partículas del líquido iónico con valores constantes de $300K$ y $0.7nm$ respectivamente. Para el primer caso, al aplicar el modelo de simulación obtenemos una serie de valores entre el potencial eléctrico adimensional, capacitancia adimensional y la carga impuesta adimensional en el nanoporo tubular.

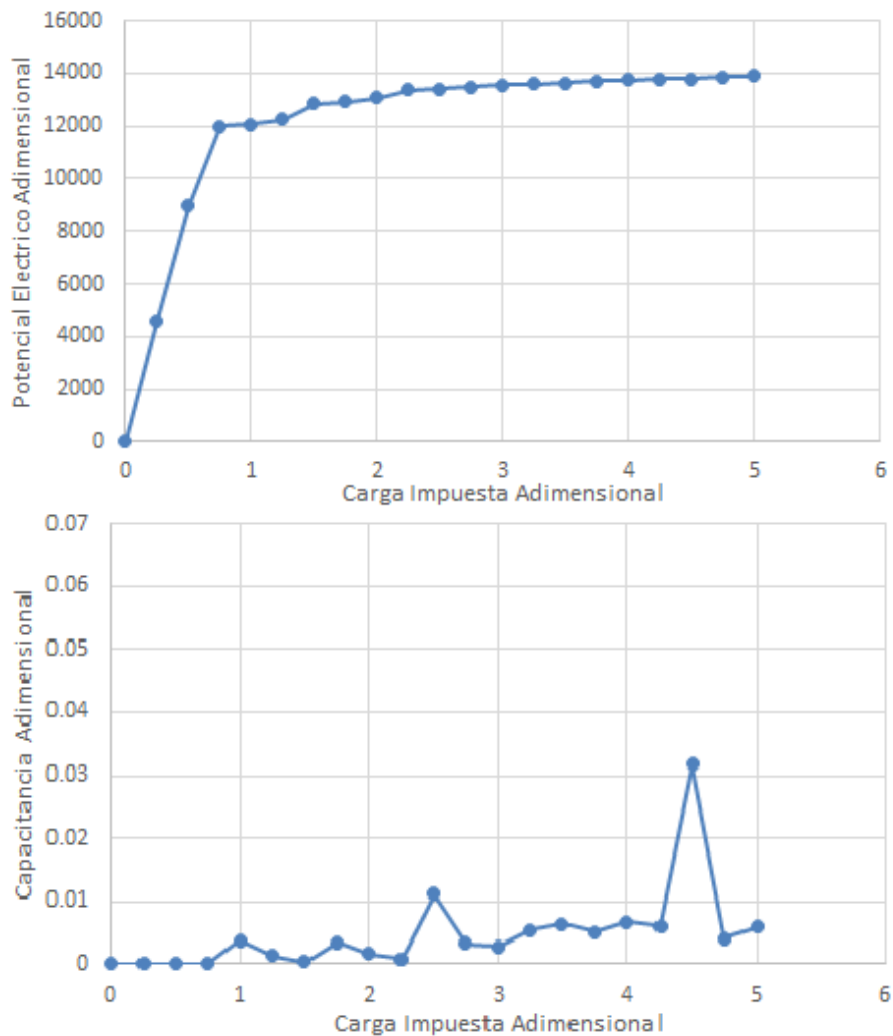


Figura 47: Para el primer caso, la tabla muestra al potencial eléctrico adimensional (arriba) y la capacitancia adimensional (abajo) cuando varía la carga impuesta adimensional en ambos lados del nanoporo. Habiendo usado el segundo modelo, para una permitividad eléctrica relativa de 55, cuando el diámetro del nanoporo es igual al triple del diámetro de las partículas que componen el líquido iónico.

En la figura 47 es evidente como el valor del potencial eléctrico adimensional es aun mayor que los valores obtenidos anteriormente. Pero los valores de la capacitancia adimensional siguen disminuyendo.

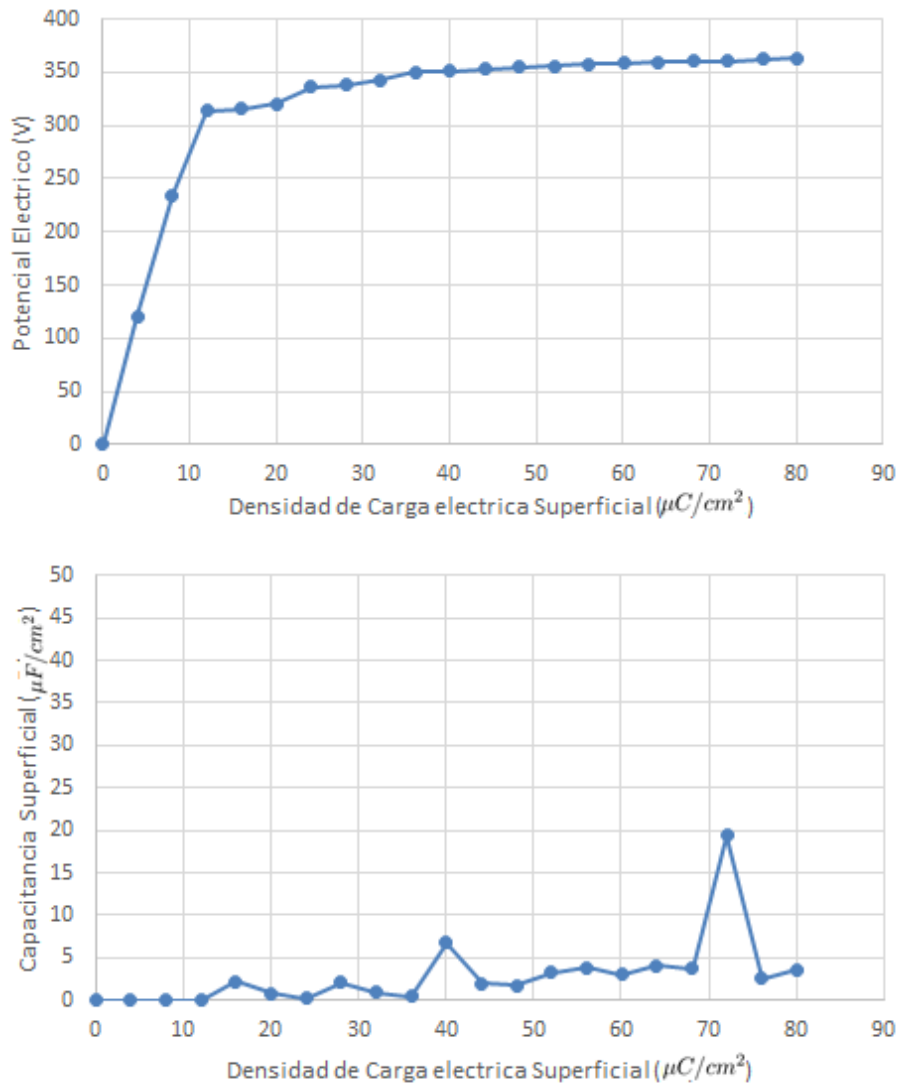


Figura 48: Para el primer caso, la tabla muestra el comportamiento del potencial eléctrico (arriba) y la capacitancia superficial (abajo) cuando varia la densidad de carga eléctrica superficial en ambos lados del nanoporo tubular. Esta tabla es igual que la anterior, pero incluyendo las unidades respectivas y para una permitividad eléctrica relativa de 55.

En la figura 48 vemos como el potencial eléctrico experimenta una rápido aumento para luego mantenerse en valores altos a medida que aumentamos el valor de la carga eléctrica superficial impuesta en los extremos del nanoporo tubular. Con respecto a la capacitancia, esta aumenta con un ritmo muy lento, tomando valores relativamente bajos comparados con los valores obtenidos

para diámetros menores.

Para el segundo caso, al aplicar el modelo de simulación obtenemos una serie de valores entre el potencial eléctrico adimensional, capacitancia adimensional y la carga impuesta adimensional en el nanoporo tubular.

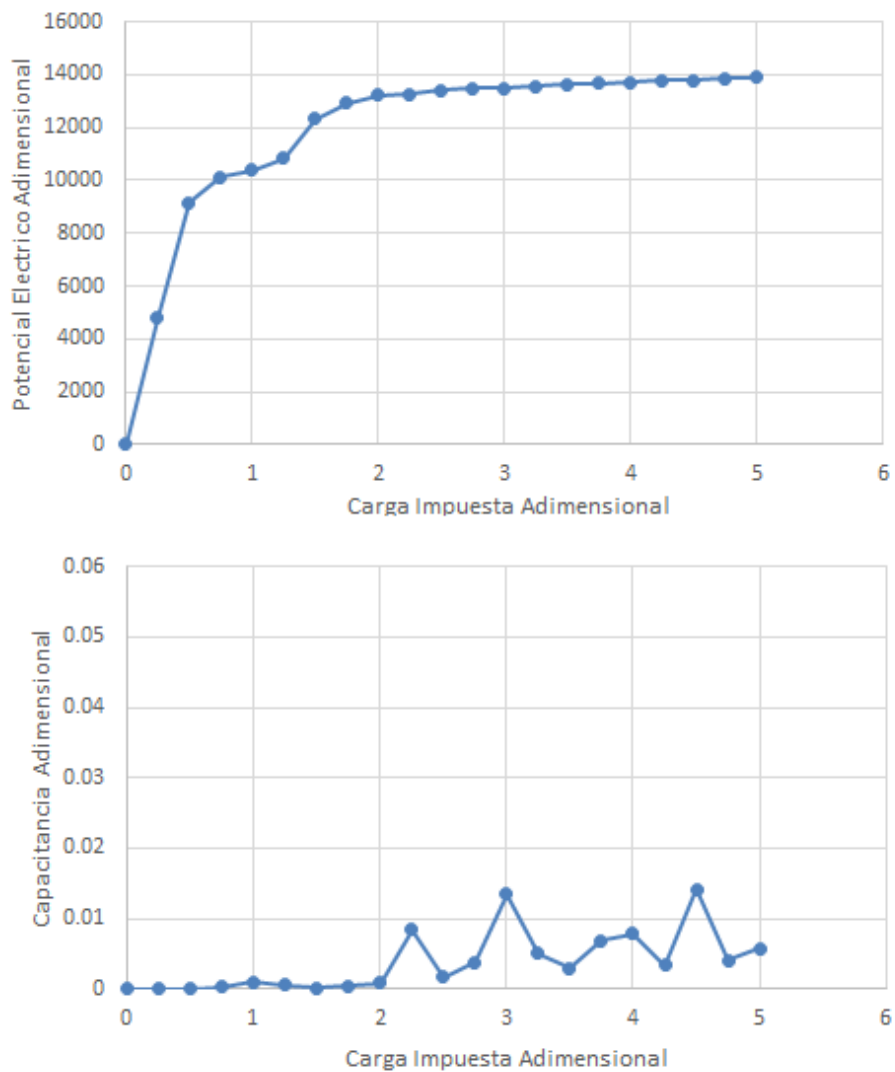


Figura 49: Para el segundo caso, la tabla muestra el comportamiento del potencial eléctrico adimensional (arriba) y la capacitancia adimensional (abajo) cuando varía la carga impuesta adimensional en los extremos del nanoporo tubular. Habiendo usado el segundo modelo, para una permitividad eléctrica relativa de 16, cuando el diámetro del nanoporo tubular es igual al triple del diámetro de los iones.

En la figura 49 vemos que el comportamiento del potencial eléctrico adimensional y de la capacitancia adimensional es el mismo que en el caso anterior. Por lo que podemos decir que el valor de

la permitividad eléctrica relativa no tiene importancia en estos valores adimensionales.

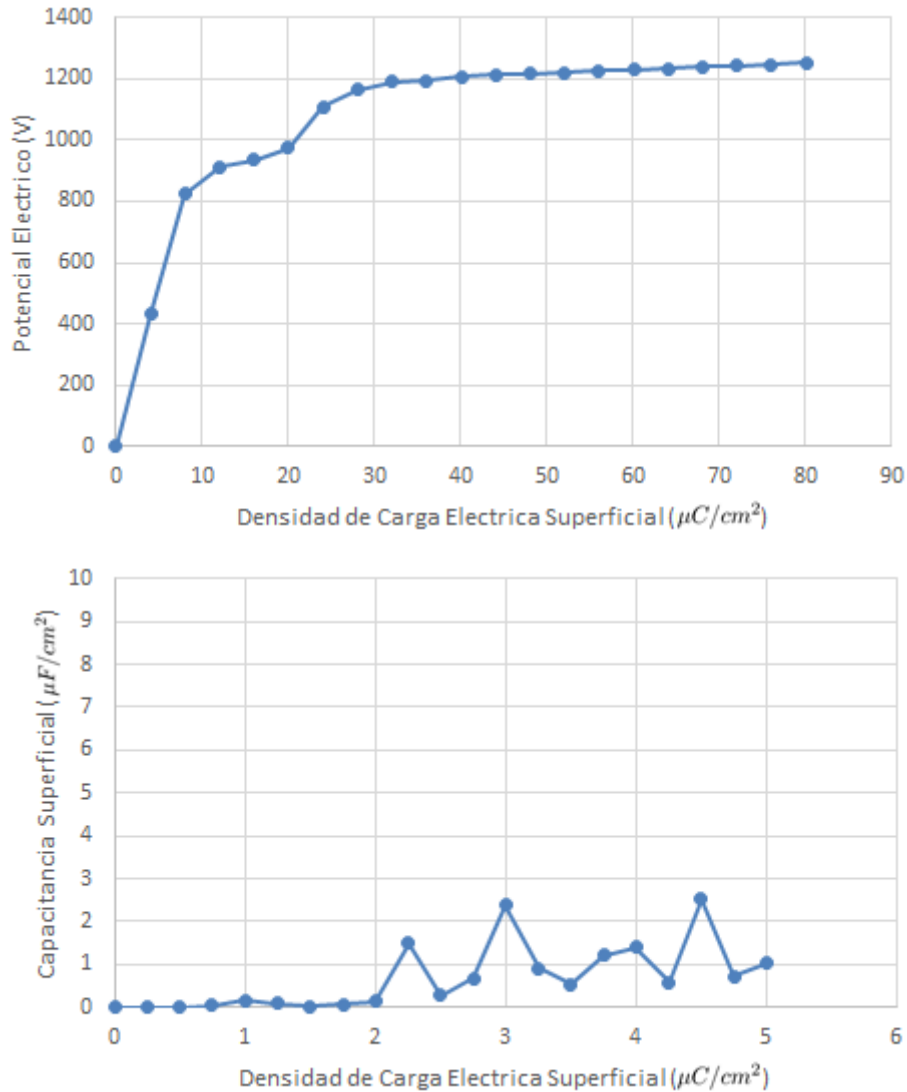


Figura 50: Para el segundo caso, la tabla muestra el comportamiento del potencial eléctrico (arriba) y la capacitancia superficial (abajo) cuando varía la densidad de carga eléctrica superficial en ambos lados del nanoporo tubular. Habiendo usado el segundo modelo, para una permitividad eléctrica relativa de 16, cuando el diámetro del nanoporo tubular es igual al triple del diámetro de las partículas que componen el líquido iónico.

En la figura 50 vemos como el potencial eléctrico experimenta un aumento muy rápido para luego mantenerse en valores altos a medida que aumentamos el valor de la carga eléctrica superficial impuesta en los extremos del nanoporo tubular. Con respecto a la capacitancia, esta aumenta con un ritmo muy lento, tomando valores relativamente bajos comparados con los valores obtenidos con nanoporos tubulares de diámetros menores. Finalmente comparamos los potenciales electricos

para todos los diámetros de nanoporo en el segundo modelo.

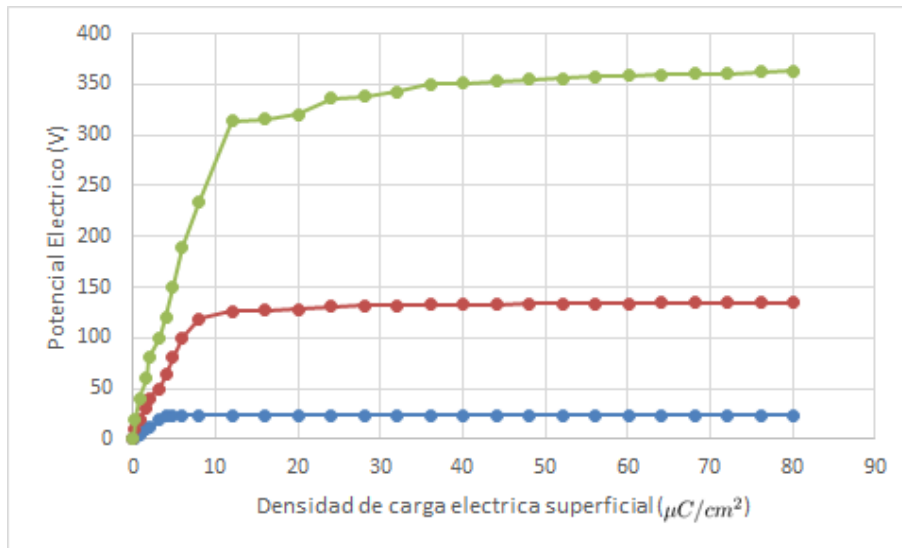


Figura 51: Comparación entre los potencial electricos para nanoporos tubulares de 1nm (azul), 2nm (rojo) y 3nm (verde); considerando una permitividad electrica de 55.

En la figura 51 se muestra una comparación entre los valores obtenidos para los distintos diámetros con una permitividad electrica de 55.

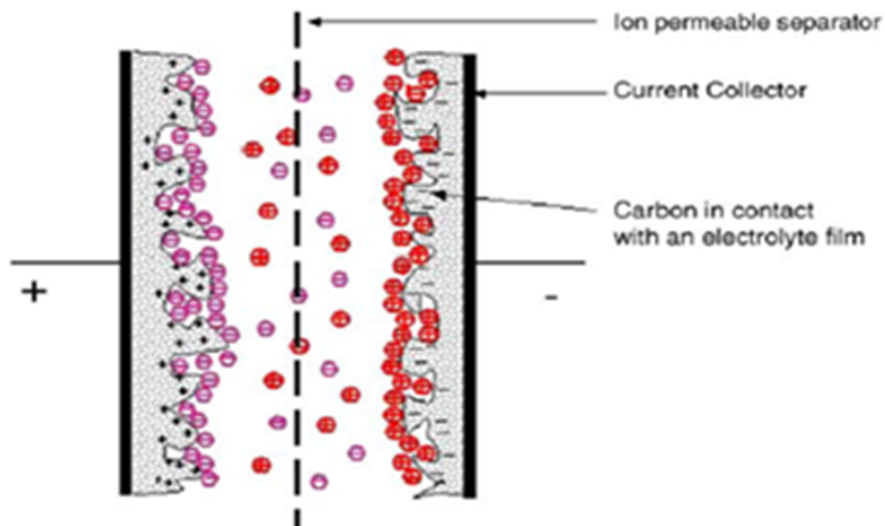


Figura 52: Comparación entre los potencial electricos para nanoporos tubulares de 1nm (azul), 2nm (rojo) y 3nm (verde); considerando una permitividad electrica de 16.

En la figura 52 se muestra una comparación entre los valores obtenidos para los distintos diámetros con una permitividad eléctrica de 16. Vemos que los valores mas altos son para un valor de permitividad eléctrica relativa pequeño.

Parte V

Conclusiones

- 1) Los resultados de la simulación se asemejan a los datos reales. Por lo que se puede considerar que el modelo produce resultados aceptables.
- 2) En el primer modelo de simulación, los valores de la capacitancia alcanzan valores de alrededor de $60\mu F/cm^2$ para una permitividad eléctrica relativa de 80, y alcanzan valores alrededor de $350\mu F/cm^2$ para una permitividad eléctrica relativa de 16. Pero si se aumenta el diámetro de los nanoporos, los valores de capacitancia disminuyen por debajo de $1\mu F/cm^2$.
- 3) En el segundo modelo de simulación, los valores de la capacitancia alcanzan valores de alrededor de $5000\mu F/cm^2$. Pero si se aumenta el diámetro de los nanoporos, los valores de capacitancia disminuyen por debajo de $1\mu F/cm^2$.
- 4) En el primer modelo de simulación, los valores de potencial eléctrico alcanzan cantidades alrededor de $6V$ para una permitividad eléctrica relativa de 80, y alcanzan cantidades alrededor de $30V$ para una permitividad eléctrica relativa de 16.
- 5) En el segundo modelo de simulación, los valores de potencial eléctrico alcanzan cantidades alrededor de $350V$ para una permitividad eléctrica relativa de 80, y alcanzan cantidades alrededor de $1200V$ para una permitividad eléctrica relativa de 16.
- 6) Para el primer modelo de simulación, si variamos las dimensiones del nanoporo tubular aumentando la distancia entre las cargas impuestas en los extremos, el aumento en el potencial eléctrico tenderá a 0. Y para una longitud del nanoporo mayor a una longitud equivalente a 40 veces el diámetro de los iones que conforman el líquido iónico, el aumento del potencial eléctrico es despreciable.
- 7) Para el segundo modelo de simulación, si variamos las dimensiones del nanoporo tubular aumentando la longitud del mismo, el aumento en el potencial eléctrico tiene un comportamiento lineal en relación a la longitud del nanoporo.

8) Se pueden generar picos en la capacitancia eligiendo un líquido iónico con un valor de permitividad eléctrica relativa baja.

Parte VI

Anexos

Anexo A: Promedio de carga eléctrica adimensional a lo largo de un nanoporo tubular en el primer modelo

Q=0.00	Q=0.25	Q=0.50	Q=0.75	Q=1.00
0.000742	-0.349663	-0.674321	-0.828149	-0.922078
0.008001	0.156817	0.269539	0.301535	0.258411
-0.016063	-0.052037	-0.134585	-0.1275	-0.13316
0.023274	0.057536	0.046499	0.082321	0.049417
-0.008669	-0.0198	-0.025022	-0.039055	-0.027204
0.014597	0.031685	0.010458	0.041358	0.007728
-0.004297	-0.004939	-0.004319	-0.003781	-0.013729
-0.004741	0.011223	-0.007401	0.007505	0.023777
-0.001845	0.014626	-0.016197	0.001173	-0.031698
-0.011827	-0.0112	0.005228	0.007103	0.019973
0.028791	0.033749	0.002301	0.013033	-0.013444
-0.028546	0.004472	-0.012591	0.001753	0.004938
0.028049	-0.000793	0.005048	0.010976	0.022054
-0.006462	0.018375	-0.007519	-0.005103	-0.045952
0.010776	0.003525	-0.016882	0.020545	0.043979
-0.004014	0.007249	0.004544	0.012097	-0.039846
0.011397	-0.006799	0.003811	-0.016075	0.02255
-0.000613	0.02251	0.001036	0.020929	-0.031116
-0.00038	0.011273	-0.003828	0.014772	0.023407
-0.007208	0.02403	-0.003737	-0.005108	-0.009901
0.011058	-0.009908	-0.018031	0.030482	0.001767
-0.012557	0.032194	-0.008533	-0.003097	0.0151
0.018523	-0.01987	0.009151	0.003484	-0.01532
-0.015503	0.019857	-0.027499	-0.010353	0.028705
0.010594	0.015377	0.020727	0.038123	-0.016047
-0.011536	0.003394	-0.02522	-0.006234	-0.002503
0.018468	0.005464	-0.004603	0.029819	-0.003864
-0.009174	0.00216	0.018391	-0.000674	0.01504
-0.003531	0.007561	-0.023383	0.014567	-0.001062
0.019117	0.004879	0.01819	0.001779	0.004004
-0.015515	0.035661	-0.027083	0.024578	-0.014002
0.014326	-0.001825	0.009712	-0.003578	0.012403
-0.024357	0.01804	-0.011109	0.025817	-0.001392
0.00769	0.001491	0.01036	-0.006868	-0.000429
0.019289	0.003913	-0.02336	0.020502	0.009914
-0.012963	0.025475	0.022753	0.016786	-0.003698
0.006985	-0.019231	-0.051932	-0.026544	-0.002346
-0.007842	0.059836	0.102143	0.142974	0.077859
0.01393	-0.142293	-0.277116	-0.273796	-0.186409
-0.008149	0.391817	0.666146	0.840204	0.916418

Tabla 2: Promedio de carga eléctrica adimensional a lo largo de un nanoporo tubular usando el primer modelo. Con una permitividad eléctrica relativa de 80. Considerando que las partículas del líquido iónico tienen cargas eléctricas de $+e$ y $-e$, temperatura absoluta de 300K, un diámetro de partículas de 0.7nm. Con cargas impuestas adimensionales Q de 0, 0.25, 0.50, 0.75 y 1.00

Q=1.25	Q=1.50	Q=1.75	Q=2.00	Q=2.25
-0.962193	-0.979878	-0.990422	-0.995429	-0.997586
0.136871	0.04392	-0.032173	-0.188669	-0.253432
-0.109041	-0.093687	-0.057467	0.004637	0.020031
0.022227	-0.017492	-0.039665	-0.098465	-0.076097
-0.032976	-0.02431	-0.022755	-0.007645	0.005535
-0.000512	-0.002124	0.001491	-0.032911	-0.024076
-0.024065	-0.012225	-0.024159	-0.02438	-0.004885
0.005235	-0.014354	-0.010293	-0.025376	-0.001694
-0.025055	0.00455	-0.003658	-0.01478	-0.027875
0.009348	-0.031521	0.002529	-0.041279	0.005975
-0.015414	0.01346	-0.018957	0.002051	-0.012059
-0.020337	-0.035315	0.009908	-0.019581	0.00489
0.005039	0.016341	-0.014014	-0.016877	-0.005046
-0.018577	-0.027113	-0.004407	-0.012035	-0.005144
-0.007438	-0.003744	-0.006902	-0.020204	0.011442
0.002626	-0.015161	-0.015077	-0.01769	-0.006293
-0.008785	-0.014425	-0.004939	-0.003082	0.017524
0.006592	-0.011145	0.014999	-0.012601	-0.017954
-0.021001	0.018717	-0.028547	0.00132	0.012278
-0.005262	-0.025134	0.021489	-0.017898	0.00481
-0.012239	0.011645	-0.01086	-0.009715	-0.001426
0.015662	-0.016787	-0.016066	-0.003188	-0.012091
-0.021962	-0.003947	0.016562	-0.005765	0.020673
-0.001974	-0.001953	-0.033912	-0.024672	0.008475
-0.004012	-0.02461	0.037961	-0.009218	-0.007375
-0.011468	0.013117	-0.022133	-0.002635	0.019463
-0.002255	0.004801	-0.000648	0.005162	0.009282
-0.019703	-0.021111	0.005058	-0.023243	0.015573
0.01387	0.014196	0.00686	0.005381	-0.024051
-0.008175	0.004352	-0.014277	-0.008253	0.046432
-0.017877	-0.012014	0.018976	-0.006235	-0.020839
0.011377	-0.005648	-0.013481	-0.0173	0.038254
-0.010829	0.023826	-0.000106	0.015621	-0.004536
-0.002389	-0.012708	0.017589	-0.024417	0.028752
-0.011689	0.006193	0.005233	0.030448	0.020165
0.02226	0.008364	0.027234	-0.030988	0.025869
-0.040655	0.010416	0.012638	0.05913	0.057552
0.107407	0.058687	0.023906	-0.003826	-0.008585
-0.175981	-0.081798	0.057931	0.123236	0.249202
0.956938	0.980917	0.989335	0.992613	0.997634

Tabla 3: Promedio de carga eléctrica adimensional a lo largo de un nanoporo tubular usando el primer modelo. Con una permitividad eléctrica relativa de 80. Considerando que las partículas del líquido iónico tienen cargas eléctricas de $+e$ y $-e$, temperatura absoluta de 300K, un diámetro de partículas de 0.7nm. Con cargas impuestas adimensionales Q de 1.25, 1.50, 1.75, 2.00 y 2.25

Q=2.50	Q=2.75	Q=3.00	Q=3.25	Q=3.50
-0.998545	-0.998682	-0.99916	-0.999652	-0.999777
-0.361161	-0.455317	-0.495216	-0.599639	-0.70038
0.065017	0.025173	0.037301	0.030782	0.017877
-0.104041	-0.100072	-0.106257	-0.136626	-0.163921
-0.005126	-0.027107	-0.016486	-0.034301	-0.04549
-0.039014	-0.045874	-0.037122	-0.064137	-0.042523
0.021717	-0.022923	0.001007	-0.003281	-0.062787
-0.034548	-0.019402	-0.025099	-0.043515	-0.016617
0.022834	-0.02971	-0.008396	-0.020675	-0.062668
-0.027585	0.002749	0.004278	-0.036413	-0.015183
0.01212	-0.015829	-0.010537	-0.005738	-0.048913
-0.017793	-0.029248	-0.015505	-0.024043	0.003287
0.002484	-0.011387	-0.000711	-0.014325	-0.041247
-0.024879	-0.001989	0.008179	-0.005476	-0.02259
0.020919	-0.008688	-0.000553	-0.021771	-0.033571
-0.007179	-0.008828	0.009622	-0.005302	-0.016199
0.017258	-0.008404	-0.009686	-0.014236	-0.018433
-0.024583	-0.002286	0.013619	-0.006487	-0.007728
0.029524	-0.02624	0.012676	0.002661	-0.030923
-0.000307	-0.000235	0.006112	-0.012072	-0.012545
-0.00185	0.001626	-0.006619	0.003467	-0.022417
0.015724	0.000295	0.023981	-0.020442	-0.014125
0.006746	-0.01372	-0.005813	-0.00331	-0.014165
0.00565	0.026815	0.006042	0.0046	-0.025392
0.019561	-0.045814	0.017554	-0.013156	-0.000227
0.007842	0.03026	0.013771	-0.005269	-0.02251
0.004675	-0.015425	0.006685	-0.006992	0.011262
0.002175	-0.00384	0.007842	0.01408	-0.048109
0.011178	0.017884	0.013852	0.000677	0.036467
0.022486	0.00733	0.014158	0.013889	-0.040262
0.004607	-0.005105	0.006134	-0.026765	0.009097
0.018547	0.010051	0.02544	0.035343	0.001811
0.0159	0.018487	0.025484	0.00205	0.018093
0.009883	0.005216	0.031002	0.03407	0.012889
0.061091	0.026888	0.039662	0.033533	0.000469
-0.004641	0.001231	0.005221	0.000602	-0.00024
0.093249	0.097651	0.142806	0.135505	0.133413
-0.022255	-0.050573	-0.051539	-0.064995	-0.078814
0.362196	0.444444	0.548717	0.578345	0.645427
0.999123	0.999109	0.999422	0.99925	0.999929

Tabla 4: Promedio de carga eléctrica adimensional a lo largo de un nanoporo tubular usando el primer modelo. Con una permitividad eléctrica relativa de 80. Considerando que las partículas del líquido iónico tienen cargas eléctricas de $+e$ y $-e$, temperatura absoluta de 300K, un diámetro de partículas de 0.7nm. Con cargas impuestas adimensionales Q de 2.50, 2.75, 3.00, 3.25 y 3.50

Q=3.75	Q=4.00	Q=4.25	Q=4.50	Q=4.75	Q=5.00
-0.999817	-0.999603	-0.999604	-0.999794	-0.999989	-0.999961
-0.722181	-0.767231	-0.792883	-0.853289	-0.881665	-0.905539
0.0329	0.000986	-0.022017	-0.0901	-0.137841	-0.196203
-0.139788	-0.116202	-0.119802	-0.127004	-0.098916	-0.063929
-0.044976	-0.030714	-0.035073	-0.062281	-0.107033	-0.13274
-0.004655	-0.046525	-0.03226	-0.078723	-0.045123	-0.036207
-0.055566	-0.025835	-0.028344	-0.034362	-0.048921	-0.06762
0.015992	-0.031123	-0.006615	-0.045214	-0.024948	-0.042614
-0.034761	-0.013573	-0.006667	-0.003163	-0.033675	-0.019875
0.010325	-0.033677	-0.004865	-0.046474	-0.024243	-0.03181
-0.030332	0.020662	-0.01864	-0.024019	-0.025841	-0.024702
-0.011379	-0.021053	0.011991	-0.008764	-0.017831	-0.010521
0.015985	0.010765	-0.009872	-0.017161	-0.007451	-0.020192
-0.001428	-0.002493	0.002979	-0.005076	-0.037879	-0.00483
-0.02488	0.001748	0.005438	-0.014039	-0.001285	-0.021618
0.017305	0.006209	0.000934	-0.014089	-0.002432	0.002884
-0.00939	-0.004212	0.02427	-0.004394	-0.011426	-0.029535
0.015649	0.010452	-0.011354	0.00308	-0.004953	0.009653
-0.020547	0.001007	0.019868	-0.014155	-0.004648	-0.006938
0.026982	-0.00181	0.028002	0.005122	-0.00519	0.005121
-0.009527	0.018139	0.001077	-0.016427	0.007957	-0.029766
0.008305	-0.001707	0.008812	-0.011797	-0.005961	0.021633
0.012868	0.023248	0.01307	0.006424	-0.009309	0.001561
0.002793	0.008584	0.027051	-0.002399	0.004091	-0.002652
0.01449	-0.006675	0.010314	0.004636	0.005014	0.02103
0.019857	0.034821	0.005643	0.020124	0.012484	-0.024113
0.001808	-0.00026	0.049898	0.00674	-0.003258	0.041923
0.030306	0.008761	-0.004498	-0.00302	0.021425	-0.019065
0.006076	0.017475	0.046574	0.020921	0.01657	0.026738
0.017764	0.025449	0.039468	0.005615	0.008529	0.00796
0.013856	0.031906	0.003315	0.013541	0.017187	0.036181
0.023744	0.00542	0.064248	0.032769	0.032806	0.017823
0.037921	0.055969	0.047128	0.008613	-0.00305	0.038438
0.035117	0.025139	0.046397	0.040424	0.082288	0.04385
0.060025	0.04873	0.040629	0.063433	0.020842	0.057588
0.040654	0.041911	0.088051	0.048284	0.100202	0.089408
0.140255	0.139683	0.130024	0.122161	0.101419	0.100422
-0.0171	0.026568	0.074806	0.070865	0.116409	0.18017
0.726495	0.792784	0.824767	0.84328	0.880503	0.893292
0.999872	0.999865	0.999841	0.999816	0.999836	0.999947

Tabla 5: Promedio de carga eléctrica adimensional a lo largo de un nanoporo tubular usando el primer modelo. Con una permitividad eléctrica relativa de 80. Considerando que las partículas del líquido iónico tienen cargas eléctricas de $+e$ y $-e$, temperatura absoluta de 300K, un diámetro de partículas de 0.7nm. Con cargas impuestas adimensionales Q de 3.75, 4.00, 4.25, 4.50, 4.75 y 5.00.

Q=0.25	Q=0.50	Q=0.625	Q=0.75	0.875
-0.956185	-0.997879	-0.998537	-0.99964	-0.999907
0.948895	0.984605	0.979489	0.943984	0.953095
-0.905239	-0.974011	-0.953898	-0.931686	-0.947831
0.898173	0.969777	0.950689	0.903812	0.935296
-0.855171	-0.964965	-0.931994	-0.889197	-0.930199
0.844541	0.958813	0.932221	0.871506	0.923979
-0.820983	-0.956587	-0.91509	-0.863778	-0.917032
0.816591	0.949707	0.914202	0.844061	0.905779
-0.786293	-0.946321	-0.893091	-0.831958	-0.90115
0.773985	0.947983	0.893801	0.81196	0.90083
-0.756797	-0.946537	-0.866926	-0.797584	-0.898965
0.751595	0.945911	0.862901	0.777553	0.888562
-0.733233	-0.942615	-0.836766	-0.765377	-0.885387
0.725075	0.940901	0.831334	0.744923	0.885069
-0.722521	-0.939301	-0.798513	-0.738237	-0.882047
0.726669	0.938031	0.790492	0.728231	0.878207
-0.727781	-0.935711	-0.755931	-0.729325	-0.877289
0.728325	0.932797	0.751869	0.724077	0.87481
-0.735751	-0.931247	-0.717284	-0.724079	-0.86986
0.738845	0.928083	0.723604	0.716007	0.867777
-0.742135	-0.927715	-0.705506	-0.721671	-0.866497
0.744273	0.925973	0.718463	0.720261	0.867271
-0.745747	-0.926359	-0.699094	-0.730525	-0.868607
0.746513	0.921445	0.713399	0.732599	0.869424
-0.752273	-0.918145	-0.693023	-0.74225	-0.874116
0.754011	0.917249	0.712669	0.749594	0.879667
-0.755053	-0.918439	-0.694638	-0.762421	-0.883642
0.756059	0.919305	0.713329	0.775106	0.892637
-0.766641	-0.927541	-0.702213	-0.79325	-0.896566
0.768679	0.931991	0.724683	0.805922	0.904527
-0.779485	-0.938749	-0.712424	-0.822839	-0.910691
0.782979	0.941821	0.735151	0.836422	0.9211
-0.792245	-0.947697	-0.737034	-0.848166	-0.927588
0.803201	0.951403	0.775119	0.861195	0.936545
-0.825351	-0.956105	-0.783878	-0.874701	-0.940654
0.833565	0.963137	0.836578	0.891389	0.951387
-0.861679	-0.966733	-0.846907	-0.900674	-0.955714
0.873185	0.973963	0.909142	0.923839	0.958508
-0.915551	-0.979121	-0.922748	-0.937246	-0.960723
0.920955	0.998883	0.99929	0.999147	0.999996

Tabla 6: Promedio de carga eléctrica adimensional a lo largo de un nanoporo tubular usando el primer modelo. Con una permitividad eléctrica relativa de 16. Considerando que las partículas del líquido iónico tienen cargas eléctricas de $+e$ y $-e$, temperatura absoluta de 300K, un diámetro de partículas de 0.7nm. Con cargas impuestas adimensionales Q de 0.25, 0.50, 0.625, 0.75 y 0.875.

Q=1.00	Q=1.125	Q=1.25	Q=1.50	Q=1.75
-0.999996	-0.999827	-0.999993	-0.999993	-0.999989
0.93514	0.861507	0.849589	0.333163	-0.042305
-0.932167	-0.860221	-0.848825	-0.333043	0.042505
0.916156	0.846162	0.830049	0.327679	-0.064889
-0.914331	-0.845363	-0.828423	-0.329163	0.063707
0.911679	0.837384	0.819033	0.309695	-0.064631
-0.910322	-0.836094	-0.817063	-0.309373	0.061915
0.902038	0.82589	0.807583	0.303381	-0.054567
-0.892674	-0.822115	-0.806111	-0.302587	0.051895
0.889494	0.825429	0.806389	0.291719	-0.050697
-0.88655	-0.824538	-0.802327	-0.289825	0.054581
0.875126	0.824553	0.801719	0.278171	-0.075343
-0.870794	-0.820983	-0.797363	-0.272605	0.076143
0.869837	0.821403	0.791739	0.268641	-0.092245
-0.865982	-0.818186	-0.792085	-0.268367	0.094551
0.861905	0.815101	0.787253	0.255669	-0.120793
-0.862551	-0.814576	-0.787545	-0.254933	0.123099
0.86712	0.811783	0.783569	0.237181	-0.135837
-0.866648	-0.810343	-0.781229	-0.233059	0.136607
0.87313	0.818705	0.777331	0.218969	-0.152747
-0.876945	-0.821615	-0.777771	-0.223679	0.150667
0.881817	0.822518	0.766225	0.219235	-0.151437
-0.882767	-0.820359	-0.764873	-0.221037	0.148713
0.891261	0.819815	0.754341	0.221349	-0.140627
-0.892744	-0.818128	-0.752401	-0.224121	0.143227
0.90043	0.824576	0.752111	0.224413	-0.138537
-0.900651	-0.822002	-0.753271	-0.223955	0.139787
0.907008	0.827722	0.757225	0.226553	-0.137343
-0.910245	-0.831463	-0.759189	-0.228687	0.133505
0.916013	0.834156	0.764291	0.230289	-0.133485
-0.918137	-0.837141	-0.766063	-0.225303	0.129273
0.928777	0.847353	0.770973	0.226569	-0.131897
-0.93619	-0.85417	-0.773829	-0.228759	0.127773
0.94573	0.864991	0.777597	0.229111	-0.137735
-0.948406	-0.86791	-0.780945	-0.229591	0.146357
0.955521	0.878899	0.801527	0.239509	-0.146429
-0.959109	-0.882443	-0.807723	-0.242221	0.147093
0.970544	0.897668	0.833271	0.271563	-0.134081
-0.971511	-0.898133	-0.834597	-0.272551	0.134223
0.999996	0.999996	0.999811	0.999993	0.999993

Tabla 7: Promedio de carga eléctrica adimensional a lo largo de un nanoporo tubular usando el primer modelo. Con una permitividad eléctrica relativa de 16. Considerando que las partículas del líquido iónico tienen cargas eléctricas de $+e$ y $-e$, temperatura absoluta de 300K, un diámetro de partículas de 0.7nm. Con cargas impuestas adimensionales Q de 1.00, 1.125, 1.25, 1.50 y 1.75.

Q=2.00	Q=2.25	Q=2.375	Q=2.50	Q=2.625
-0.999981	-0.999989	-0.999965	-0.999936	-0.999982
-0.767273	-0.773167	-0.905591	-0.76892	-0.975719
0.727825	0.769742	0.909969	0.722343	0.90603
-0.745716	-0.788109	-0.926508	-0.695106	-0.915636
0.712591	0.788358	0.931997	0.67042	0.854258
-0.710592	-0.792586	-0.931478	-0.618483	-0.855231
0.668396	0.77991	0.94171	0.586846	0.80613
-0.656403	-0.76133	-0.946626	-0.521612	-0.808759
0.606296	0.750248	0.950313	0.503524	0.781465
-0.607177	-0.737352	-0.940495	-0.455224	-0.785708
0.572522	0.737717	0.942528	0.455527	0.775965
-0.584147	-0.723734	-0.929562	-0.430995	-0.785892
0.563467	0.731115	0.933128	0.447099	0.778874
-0.583202	-0.723556	-0.919571	-0.427354	-0.789635
0.575727	0.727769	0.922039	0.455652	0.778865
-0.593886	-0.724916	-0.914474	-0.423779	-0.784888
0.583006	0.735576	0.928878	0.439075	0.776666
-0.601072	-0.740176	-0.92193	-0.400476	-0.782462
0.58479	0.75891	0.933663	0.403841	0.772551
-0.591986	-0.746582	-0.924783	-0.353722	-0.778519
0.569427	0.760219	0.933022	0.362059	0.766833
-0.58068	-0.747443	-0.920936	-0.316663	-0.770513
0.565428	0.766496	0.93724	0.336152	0.761107
-0.566221	-0.738653	-0.925997	-0.2996	-0.761061
0.533822	0.745946	0.933045	0.326542	0.763628
-0.519739	-0.71758	-0.913372	-0.292565	-0.773104
0.491985	0.716836	0.923018	0.333739	0.77243
-0.498332	-0.690299	-0.90895	-0.319113	-0.777998
0.47013	0.701951	0.91992	0.381843	0.778917
-0.471145	-0.682596	-0.906038	-0.379153	-0.783795
0.456306	0.704291	0.919117	0.472379	0.795551
-0.453492	-0.693856	-0.908918	-0.4582	-0.807922
0.443077	0.715733	0.922347	0.559529	0.816588
-0.441311	-0.700071	-0.912184	-0.562367	-0.828058
0.441819	0.728863	0.934784	0.66377	0.850124
-0.448426	-0.731961	-0.919446	-0.651019	-0.862027
0.456496	0.78364	0.941555	0.784211	0.886205
-0.45799	-0.782036	-0.920988	-0.775496	-0.893255
0.460031	0.859337	0.960612	0.950929	0.929123
0.999993	0.999993	0.999996	0.999993	0.999996

Tabla 8: Promedio de carga eléctrica adimensional a lo largo de un nanoporo tubular usando el primer modelo. Con una permitividad eléctrica relativa de 16. Considerando que las partículas del líquido iónico tienen cargas eléctricas de $+e$ y $-e$, temperatura absoluta de 300K, un diámetro de partículas de 0.7nm. Con cargas impuestas adimensionales Q de 2.00, 2.25, 2.375, 2.50 y 2.625.

Q=2.75	Q=2.875	Q=3.00	Q=3.125	Q=3.50
-0.999965	-0.999995	-0.999969	-0.999982	-0.999982
-0.986569	-0.987129	-0.994755	-0.995737	-0.997638
0.981175	0.949839	0.978759	0.961668	0.706908
-0.987615	-0.953417	-0.979478	-0.960939	-0.712948
0.988045	0.935856	0.970864	0.95033	0.621798
-0.987095	-0.935177	-0.965291	-0.947676	-0.626686
0.984697	0.921835	0.955062	0.942646	0.565865
-0.985279	-0.9186	-0.946802	-0.940344	-0.569774
0.984989	0.902853	0.933924	0.936028	0.53289
-0.985403	-0.899403	-0.92816	-0.935509	-0.535042
0.982091	0.89108	0.917214	0.936943	0.504698
-0.977991	-0.888732	-0.908115	-0.938147	-0.504724
0.977193	0.885356	0.903867	0.940099	0.474658
-0.979877	-0.88803	-0.897615	-0.941527	-0.474076
0.982891	0.882898	0.89429	0.950009	0.461196
-0.986945	-0.88557	-0.888455	-0.952476	-0.463286
0.987803	0.884032	0.883286	0.959974	0.452587
-0.990547	-0.885304	-0.871639	-0.961162	-0.456883
0.992495	0.884807	0.867683	0.96558	0.460624
-0.992967	-0.88595	-0.854907	-0.964096	-0.464412
0.995209	0.886398	0.852212	0.967093	0.471423
-0.996077	-0.88684	-0.842985	-0.969946	-0.47761
0.996579	0.892537	0.842456	0.980278	0.485002
-0.994661	-0.893261	-0.837085	-0.98194	-0.490008
0.995295	0.904482	0.840074	0.988099	0.501445
-0.994107	-0.906341	-0.835121	-0.987021	-0.50613
0.994621	0.915494	0.837353	0.990304	0.514065
-0.993893	-0.915142	-0.833212	-0.988009	-0.521866
0.992957	0.9222	0.839064	0.98691	0.536293
-0.992911	-0.922392	-0.838145	-0.988837	-0.556024
0.990377	0.929574	0.847874	0.989094	0.582384
-0.992371	-0.929245	-0.846341	-0.990166	-0.60824
0.990559	0.932519	0.859738	0.9902	0.641012
-0.989313	-0.934127	-0.857609	-0.988432	-0.671113
0.989335	0.948217	0.884402	0.988129	0.716162
-0.989493	-0.948954	-0.88259	-0.989351	-0.754991
0.993561	0.968459	0.924934	0.990187	0.811837
-0.993947	-0.970119	-0.921295	-0.990171	-0.837037
0.997389	0.995322	0.992983	0.997899	0.991452
0.999765	0.999965	0.999985	0.999996	0.999991

Tabla 9: Promedio de carga eléctrica adimensional a lo largo de un nanoporo tubular usando el primer modelo. Con una permitividad eléctrica relativa de 16. Considerando que las partículas del líquido iónico tienen cargas eléctricas de $+e$ y $-e$, temperatura absoluta de 300K, un diámetro de partículas de 0.7nm. Con cargas impuestas adimensionales Q de 2.75, 2.875, 3.00, 3.125 y 3.50.

Q=3.75	Q=3.875	Q=4.00	Q=4.125	Q=4.25
-0.999978	-0.999937	-0.999965	-0.999982	-0.999953
-0.999104	-0.999283	-0.999365	-0.997617	-0.999463
0.514922	0.657938	0.710489	0.039929	0.417889
-0.51018	-0.658172	-0.711841	-0.0422595	-0.420581
0.404222	0.597214	0.669653	-0.103379	0.357346
-0.400584	-0.598374	-0.668633	0.104592	-0.363019
0.33512	0.563667	0.639119	-0.173759	0.339713
-0.324255	-0.563524	-0.638077	0.177924	-0.345465
0.279696	0.531307	0.619117	-0.21883	0.338604
-0.269612	-0.531343	-0.619541	0.228052	-0.343454
0.233383	0.513703	0.600273	-0.252154	0.339253
-0.229308	-0.513074	-0.598467	0.261311	-0.340723
0.205098	0.505536	0.583871	-0.277451	0.337482
-0.202355	-0.504343	-0.583785	0.282936	-0.335949
0.178151	0.494652	0.576085	-0.288223	0.331526
-0.17547	-0.495042	-0.575555	0.292975	-0.327609
0.166747	0.498098	0.576605	-0.294086	0.328515
-0.164889	-0.498755	-0.582177	0.297764	-0.328349
0.164223	0.505498	0.587815	-0.292626	0.332372
-0.163722	-0.507325	-0.582585	0.296754	-0.329646
0.173681	0.522096	0.595107	-0.292204	0.336621
-0.17782	-0.525572	-0.599799	0.30055	-0.335258
0.193819	0.527598	0.611465	-0.307277	0.340121
-0.195626	-0.52646	-0.615089	0.313666	-0.336069
0.217336	0.535764	0.621765	-0.315228	0.33923
-0.215999	-0.533652	-0.620519	0.323639	-0.333014
0.235911	0.54389	0.635063	-0.316496	0.33447
-0.235174	-0.539929	-0.637955	0.321076	-0.327036
0.260933	0.553136	0.651661	-0.308574	0.332735
-0.258522	-0.554504	-0.651445	0.310995	-0.325342
0.276487	0.562028	0.656565	-0.290857	0.335263
-0.275449	-0.562451	-0.657059	0.29513	-0.327242
0.306232	0.580639	0.672573	-0.268622	0.342372
-0.303536	-0.580153	-0.668857	0.277162	-0.338211
0.365877	0.609768	0.692169	-0.205009	0.36737
-0.363295	-0.609302	-0.687241	0.213487	-0.357432
0.49066	0.672171	0.727813	-0.039797	0.433718
-0.488903	-0.671727	-0.727281	0.051476	-0.420626
0.998286	0.998222	0.998197	0.999409	0.999173
0.999996	0.999996	0.999831	0.999996	0.999994

Tabla 10: Promedio de carga eléctrica adimensional a lo largo de un nanoporo tubular usando el primer modelo. Con una permitividad eléctrica relativa de 16. Considerando que las partículas del líquido iónico tienen cargas eléctricas de $+e$ y $-e$, temperatura absoluta de 300K, un diámetro de partículas de 0.7nm. Con cargas impuestas adimensionales Q de 3.75, 3.875, 4.00, 4.125 y 4.25.

Q=4.50	Q=4.75	Q=4.875	Q=5.00
-0.999989	-0.999993	-0.999885	-0.999991
-0.999581	-0.999461	-0.999676	-0.999999
-0.324253	-0.719489	-0.604255	-0.667796
0.324049	0.718133	0.450226	0.663826
-0.443611	-0.813033	-0.541945	-0.742816
0.432625	0.798963	0.455211	0.729521
-0.461385	-0.817729	-0.477975	-0.752734
0.454397	0.816167	0.418734	0.739299
-0.469727	-0.828787	-0.443402	-0.746999
0.460545	0.826053	0.401039	0.739791
-0.464783	-0.824187	-0.414755	-0.741349
0.464615	0.820071	0.375889	0.733601
-0.466399	-0.820537	-0.38589	-0.736306
0.471469	0.815699	0.353559	0.732151
-0.471199	-0.810065	-0.362179	-0.728266
0.476373	0.807975	0.313983	0.725169
-0.466963	-0.801545	-0.313574	-0.727074
0.468185	0.792821	0.272836	0.722999
-0.456685	-0.788593	-0.265173	-0.723376
0.455231	0.785229	0.223759	0.725769
-0.445843	-0.782133	-0.219414	-0.728764
0.446193	0.781581	0.182287	0.730084
-0.441529	-0.777745	-0.171249	-0.727636
0.441261	0.772531	0.124035	0.722974
-0.435063	-0.765001	-0.108794	-0.724386
0.438653	0.765063	0.066538	0.730456
-0.422675	-0.750947	-0.049018	-0.728214
0.421811	0.753595	0.0216955	0.736281
-0.406423	-0.723821	-0.016069	-0.728769
0.407147	0.729347	0.0018435	0.734721
-0.391199	-0.708793	-0.006496	-0.735761
0.389323	0.713275	-0.0029235	0.746476
-0.364535	-0.684067	0.002735	-0.740571
0.372017	0.700937	-0.007481	0.752406
-0.317429	-0.659399	0.020035	-0.742411
0.322631	0.671915	-0.017306	0.750414
-0.195091	-0.562947	0.077952	-0.647224
0.197845	0.569091	-0.056681	0.654799
0.999999	0.999833	0.997342	0.999714
0.999993	0.999993	0.999992	0.999991

Tabla 11: Promedio de carga eléctrica adimensional a lo largo de un nanoporo tubular usando el primer modelo. Con una permitividad eléctrica relativa de 16. Considerando que las partículas del líquido iónico tienen cargas eléctricas de $+e$ y $-e$, temperatura absoluta de 300K, un diámetro de partículas de 0.7nm. Con cargas impuestas adimensionales Q de 4.50, 4.75, 4.875 y 5.00.

Anexo B: Promedio de carga eléctrica adimensional a lo largo de un nanoporo tubular en el segundo modelo

Q=0.01	Q=0.10	Q=0.12	Q=0.25	Q=0.37	Q=0.50
-0.041581	-0.649303	-0.703456	-0.976863	-0.999393	-0.998809
-0.028492	-0.261785	-0.386012	-0.954802	-0.999675	-0.999303
-0.02403	-0.366338	-0.425981	-0.950227	-0.999497	-0.999849
-0.023633	-0.401738	-0.475473	-0.949918	-0.999594	-0.999491
-0.037403	-0.365584	-0.44894	-0.948562	-0.999661	-0.999553
-0.028217	-0.385104	-0.461696	-0.944732	-0.99953	-0.999755
-0.032104	-0.383892	-0.451383	-0.946448	-0.999639	-0.999675
-0.033696	-0.371256	-0.451407	-0.942927	-0.999674	-0.999623
-0.027287	-0.38992	-0.45713	-0.942569	-0.999681	-0.999851
-0.030533	-0.378498	-0.456531	-0.945146	-0.999593	-0.999999
-0.060312	-0.386529	-0.464057	-0.940316	-0.999452	-0.999723
-0.006795	-0.372593	-0.456277	-0.943995	-0.999802	-0.999951
-0.048484	-0.386969	-0.454946	-0.941298	-0.999678	-0.999595
-0.032857	-0.38537	-0.460183	-0.941078	-0.998887	-0.999369
-0.022234	-0.356793	-0.445734	-0.93911	-0.998765	-0.999185
-0.024917	-0.399051	-0.461976	-0.93478	-0.998886	-0.998705
-0.043812	-0.366572	-0.458033	-0.935416	-0.998537	-0.998247
-0.047999	-0.368859	-0.440175	-0.932289	-0.996775	-0.996021
0.005619	-0.361434	-0.435761	-0.928804	-0.996141	-0.997105
-0.063095	-0.441116	-0.524543	-0.916444	-0.989546	-0.994703
0.075156	0.446263	0.533621	0.926588	0.893348	0.989821
0.010499	0.364597	0.451637	0.939791	0.94732	0.998231
0.061757	0.361344	0.446974	0.93662	0.965035	0.997551
0.03324	0.372773	0.457778	0.940129	0.973396	0.998723
0.059755	0.370952	0.472031	0.945774	0.978256	0.999463
0.01419	0.386274	0.466871	0.946921	0.980628	0.99891
0.067858	0.379416	0.46098	0.948293	0.983638	0.999959
0.032996	0.387426	0.456736	0.946871	0.984033	0.999495
0.057807	0.379584	0.466554	0.946287	0.986708	0.999849
0.031167	0.384994	0.467942	0.948132	0.98664	0.999695
0.046934	0.368757	0.458355	0.947956	0.986689	0.999899
0.040288	0.392362	0.455494	0.947584	0.986696	0.999897
0.037832	0.38124	0.461288	0.951867	0.988416	0.999985
0.043358	0.387953	0.477924	0.949522	0.987258	0.999891
0.06729	0.379601	0.454465	0.950803	0.988301	0.999807
0.030275	0.361234	0.474504	0.951184	0.986172	0.999787
0.047984	0.417895	0.475057	0.951516	0.985797	0.999577
0.046061	0.338143	0.434432	0.956807	0.98507	0.998889
0.037952	0.292612	0.40261	0.960676	0.983945	0.999267
0.064577	0.645469	0.717002	0.979061	0.98638	0.999815

Tabla 12: Promedio de carga eléctrica adimensional a lo largo de un nanoporo tubular usando el segundo modelo. Con una permitividad eléctrica relativa de 55. Considerando que las partículas del líquido iónico tienen cargas eléctricas de $+e$ y $-e$, temperatura absoluta de 300K, un diámetro de partículas de 1.0nm. Con cargas impuestas adimensionales Q de 0.01, 0.10, 0.12, 0.25, 0.37 y 0.50.

Según la tabla 12 evidente el rápido incremento en el valor del promedio de carga eléctrica adimensional en todo el nanoporo. A mayores cargas impuestas, el promedio es prácticamente el mismo.

Anexo C: Variación de la Capacitancia a temperaturas de 300K y 100K

La aplicación del modelo de simulación considerando diferentes temperaturas genera resultados diferentes en los valores de la capacitancia. A continuación se muestran los resultados de la simulación para los casos en los que se consideran temperaturas de 300K y 100K. Se toman valores para el diámetro de los iones de 1, permitividad eléctrica relativa de 60, para un diametro de nanoporo tubular de 1. Para el caso de una temperatura de 300K tenemos los siguientes resultados.

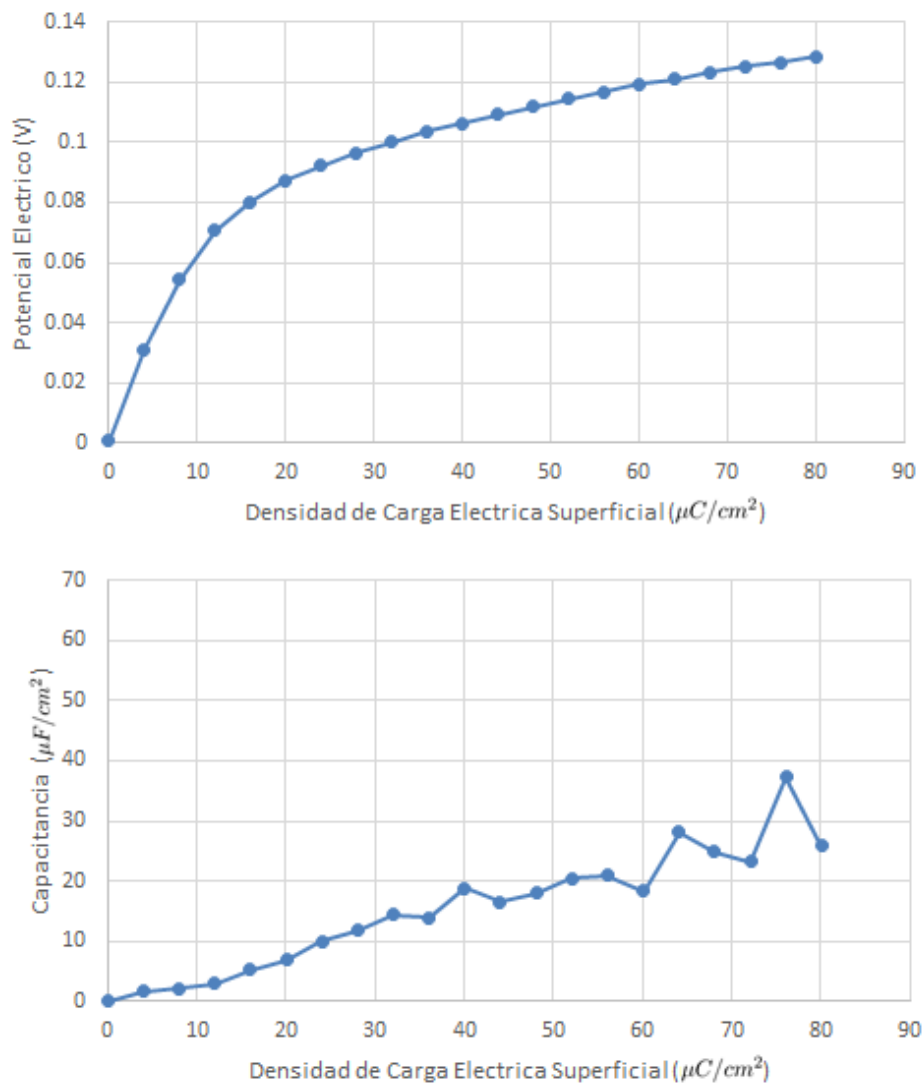


Figura 53: La figura muestra el comportamiento del potencial eléctrico (arriba) y la capacitancia (abajo) cuando varía la densidad de carga eléctrica superficial en los extremos del nanoporo tubular. Habiendo usado el primer modelo, para una permitividad eléctrica relativa de 60, cuando el diámetro del nanoporo tubular es igual al diámetro de las partículas que componen el líquido iónico, para una temperatura de 300K.

La figura 53 muestra los resultados de la simulación para el comportamiento del potencial eléctrico y la capacitancia para una temperatura de $300K$.

Para el caso de una temperatura de $100K$ tenemos los siguientes resultados.

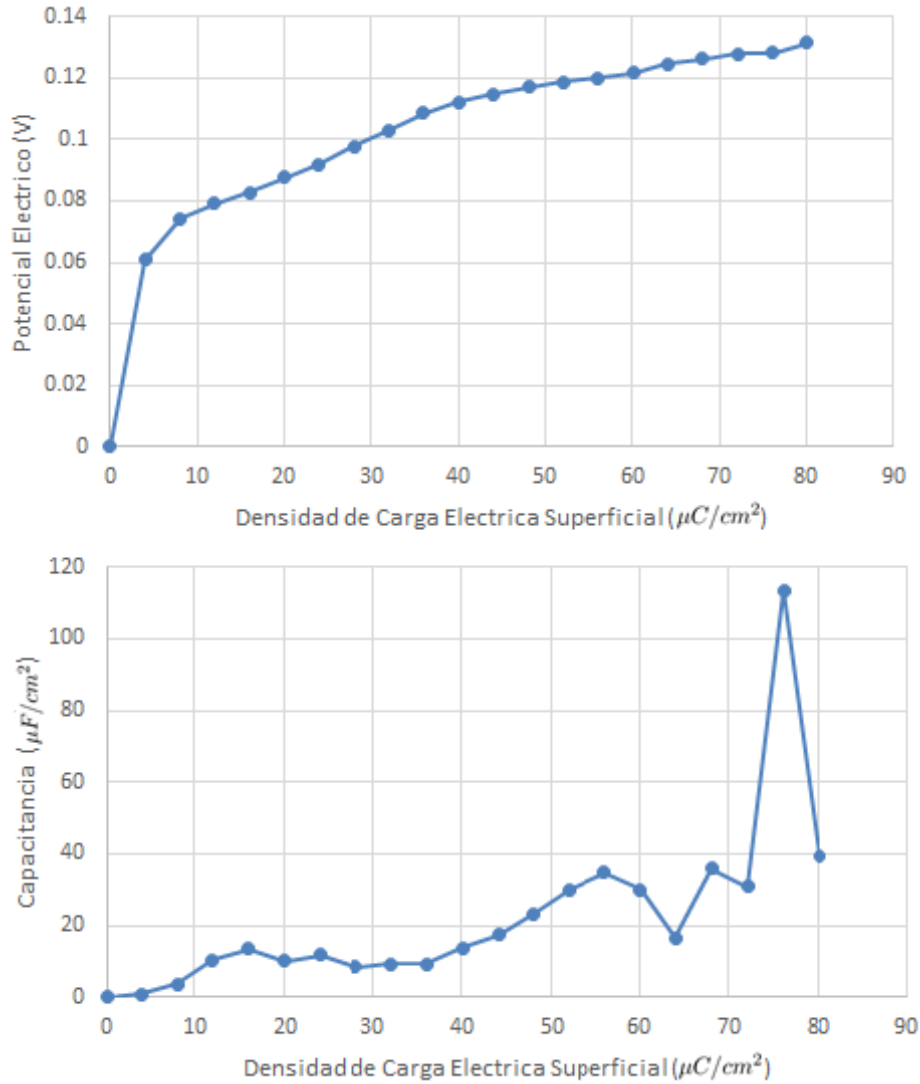


Figura 54: La figura muestra el comportamiento del potencial eléctrico (arriba) y la capacitancia (abajo) cuando varía la densidad de carga eléctrica superficial en los extremos del nanoporo tubular. Habiendo usado el primer modelo, para una permitividad eléctrica relativa de 60, cuando el diámetro del nanoporo tubular es igual al diámetro de las partículas que componen el líquido iónico. Para una temperatura de $100K$.

La figura 54 muestra los resultados de la simulación para el comportamiento del potencial eléctrico y la capacitancia para una temperatura de $100K$.

Anexo D: Picos de Capacitancia

Según los resultados de la simulación con el primer modelo, los picos de capacitancia ocurren cuando la distribución de partículas al interior del nanoporo no varía de forma significativa.

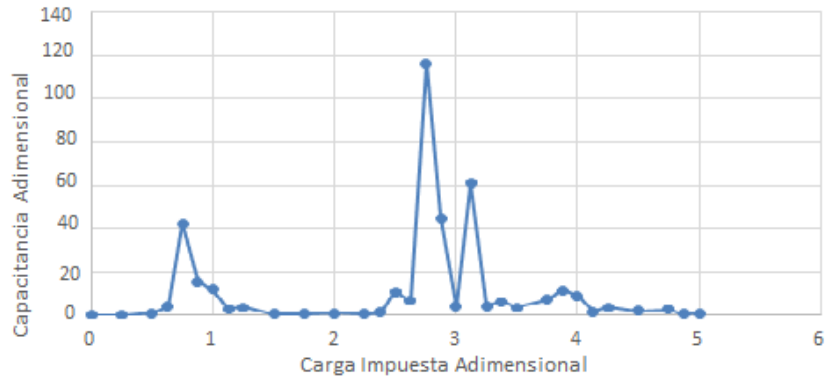


Figura 55: Aquí se ilustra los picos en la capacitancia adimensional cuando el diámetro del nanoporo es igual al diámetro de los iones.

En la figura 55 se muestran dos picos en la capacitancia adimensional, el primero alrededor de una carga adimensional de 0.75 y el segundo pico aparece alrededor de una carga adimensional de 2.75.

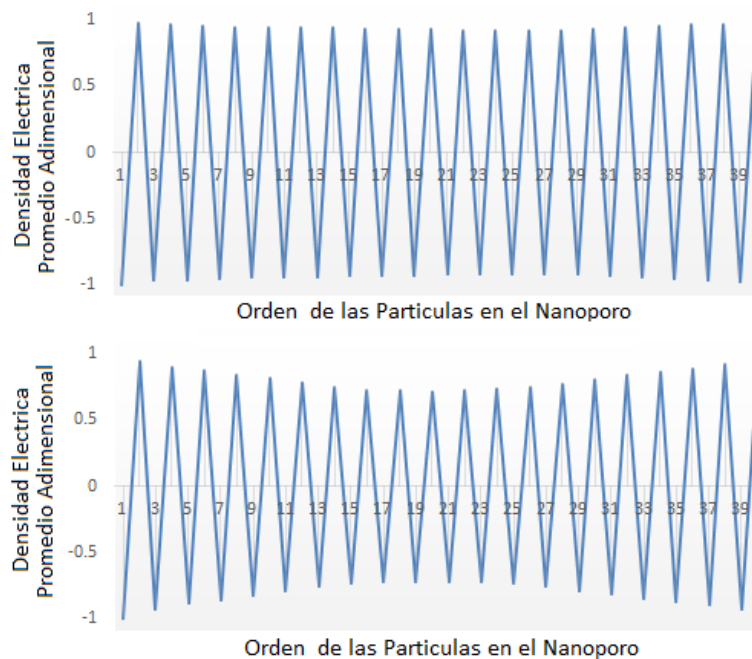


Figura 56: Densidad eléctrica adimensional promedio a lo largo del nanoporo para una carga impuesta adimensional de 0.5 (arriba), y para una carga impuesta adimensional de 0.75 (abajo).

En la figura 56 se aprecia que la distribución de partículas cambia poco. Esto significa que el

aumento en la carga impuesta adimensional no tiene un efecto apreciable sobre la distribución de partículas. Esto ocurre cuando el sistema experimenta un pico en la capacitancia.

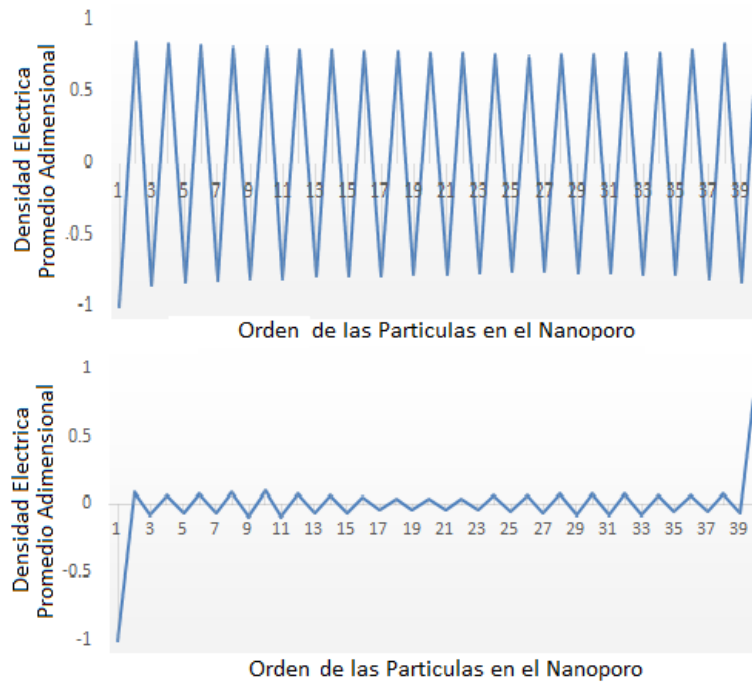


Figura 57: Se muestra la densidad eléctrica adimensional promedio a lo largo del nanoporo para una carga impuesta adimensional de 1.25 (arriba), y para una carga impuesta adimensional de 1.75 (abajo).

En la figura 57 se aprecia que la distribución de partículas cambia de forma apreciable. Esto significa que el aumento en la carga impuesta adimensional tiene un efecto apreciable sobre la distribución de partículas. Y no se produce aumento en la capacitancia,

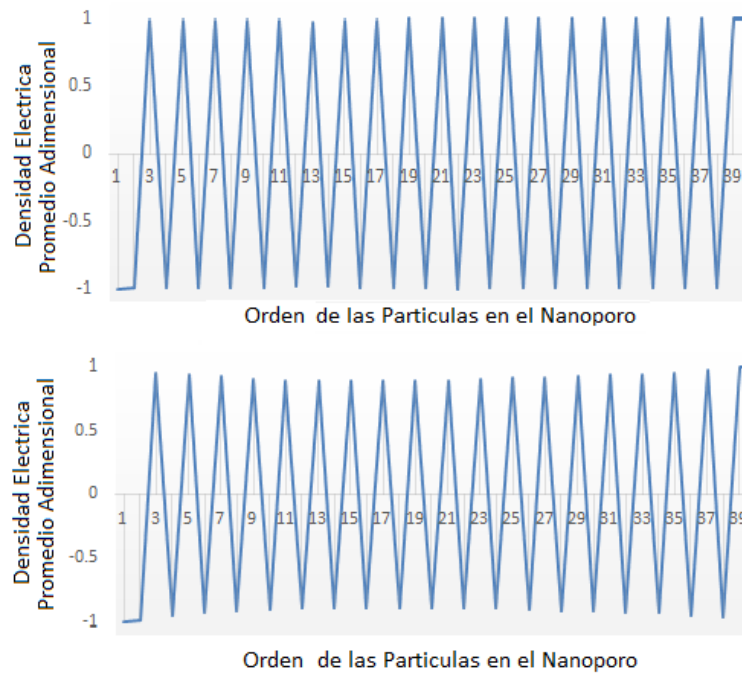


Figura 58: Se muestra la densidad eléctrica adimensional promedio a lo largo del nanoporo para una carga impuesta adimensional de 2.75 (arriba), y para una carga impuesta adimensional de 2.875 (abajo).

En la figura 58 se aprecia que la distribución de partículas cambia poco. Esto significa que el aumento en la carga impuesta adimensional no tiene un efecto apreciable sobre la distribución de partículas. Esto ocurre cuando el sistema experimenta un pico en la capacitancia.

Estos datos solo parecen confirman el hecho de que la capacitancia alcanza altos valores cuando la distribución de partículas al interior del nanoporo no varía de forma significativa. Pero esto solo ocurre cuando el diámetro del nanoporo es igual al diámetro de las partículas que contiene.

Parte VII

Bibliografía

- 1) Wang, G., Zhang L. and Zhangb, J., Chemical Society Review, 797 828, DOI: 10.1039/c1cs15060j (2012)

- 2) Skeie, E., https://brage.bibsys.no/xmlui/bitstream/handle/11250/2352110/13393_FULLTEXT.pdf?sequence=1, Norwegian University of Science and Technology (2015)

- 3) Simon, P. and Gogotsi, Y., Phil. Trans. R. Soc. A, 368, 3457 3467 (2010)

- 4) Chmiola, J., Yushin, G., Gogotsi, Y., Portet, C., Simon, P. and Taberna P., Science, 313(5794), 1760 1763 (2006)

- 5) Lee, A., Kondrat S. and Kornyshev, A., Physical Review Letter, 113, 048701 (2014)

- 6) Demery, V., Podgornik, R., Dean, D. and Hammant, T., The Journal of Chemical Physics, 064901 (2012)

- 7) Celine Largeot, Cristelle Portet, John Chmiola, Pierre Louis Taberna, Yury Gogotsi, and Patrice Simon, UniVersité Paul Sabatier (2007)

- 8) Mian Mian Huang, Yanping Jiang, Padmanabhan Sasisanker, Gordon W. Driver, and Hermann Weingartner, Journal of Chemical and Engineering Data (2011)

- 9) Guang Feng and Peter T. Cummings, Department of Chemical and Biomolecular Engineering, Vanderbilt University (2011)

- 10) Nav Nidhi Rajput, Joshua Monk, Ramesh Singh, Department of Chemical Engineering, Louisiana State University, 28592864 (2012)

- 11) Lidan Xing, Jenel Vatamanu, Oleg Borodin, and Dmitry Bedrov, Department of Materials Science and Engineering, University of Utah, 132 140 (2012)

- 12) Peng Wu, Jingsong Huang, Vincent Meunier, Bobby G. Sumpter, and Rui Qiao, Department of Mechanical Engineering, Clemson University, 9044 9051 (2011)

- 13) Bobby G. Sumpter, and Vincent Meunier, Jingsong Huang, Theoretical Model for Nanoporous Carbon Supercapacitors, DOI: 10.1002/anie.200703864 (2008)

- 14) Maxim V. Fedorov, and Alexei A. Kornyshev, Department of Physics, Scottish University Physics Alliance (SUPA), University of Strathclyde, 2978 3036 (2014)

- 15) P. Simon, and Y. Gogotsi, Capacitive Energy Storage in Nanostructured Carbon Electrolyte Systems, Université Paul Sabatier, (2011)

- 16) Svyatoslav Kondrat¹, Peng Wu, Rui Qiao and Alexei A. Kornyshev, Accelerating charging dynamics in subnanometre pores, DOI: 10.1038/NMAT3916 (2014)

- 17) Alexei A. Kornyshev, Yadong He, Jingsong Huang, Bobby G. Sumpter, and Rui Qiao, Dynamic Charge Storage in Ionic Liquids-Filled Nanopores: Insight from a Computational Cyclic Voltammetry Study, Department of Mechanical Engineering, Virginia Tech, Blacksburg, Virginia 24061, United States, (2014)

- 18) S. Kondrat¹, and A. Kornyshev¹, Superionic state in double layer capacitors with nanoporous electrodes, Department of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Imperial College London, (2011)

19) Brian Skinner, Tianran Chen, M. S. Loth, and B. I. Shklovskii, Fine Theoretical Physics Institute, University of Minnesota, Minneapolis, Minnesota, EE UU, DOI: 10.1103/PhysRevE.83.056102 (2011)

20) Maciej Galinski, Andrzej Lewandowski, Izabela Stepniak, Ionic liquids as electrolytes, Faculty of Chemical Technology, Poznań University of Technology, Poland, (2006)