

19a-F7-10

## ESM 法を用いた第一原理 MD 計算による Pt 表面での酸性水溶液の反応 The reaction of acis aqueous solution at pulatinum surface by ESM method and first-principle molecular dynamics

アドバンス ○森 一樹, 西原 慧径, 加藤 信彦, 岡崎 一行

AdvanceSoft Corp., °Kazuki Mori, Satomichi Nishihara, Nobuhiko Kato, Kazuyuki Okazaki

E-mail: mori@advancesoft.jp

近年燃料電池の分野では、計算化学を用いた電極材料、電極表面反応、電解質材料等の研究が盛んに行われている。本研究では、プロトン伝導性の高さと安定性で知られる電解質膜 Nafion® の先端骨格となるトリフルオロメタンスルホン酸 (TfOH)と水分子間のプロトン移動について第一原理分子動力学計算 (第一原理 MD 計算) を用いて解析した。またトリフルオロメタンスルホン酸 (TfOH)と水分子及び白金表面を合わせて、白金電極表面で起こる水素発生反応について同様に第一原理 MD 計算を用いて予測した。

上記の解析には擬ポテンシャル平面波基底を使用した第一原理計算ソフト「Advance/PHASE v3.2」を使用して行った。白金電極表面を含む系では ESM (Effective Screening Medium) 法<sup>1</sup>と第一原理 MD 計算を合わせて電極界面の計算を行った。計算に使用した(TfOH と水分子)/Pt 表面の構造モデルを下記の図 1 に示す。図 2 に白金表面に移動する水素原子との距離、電荷ドープ量の変化を示した結果を示す。計算を開始して 250fs で白金に水素原子が移動し、またユニットセル当たり 0.12 電子入った状態であった。さらに反応が起こった個所の各原子の電荷も Advance/PHASE の機能を使用し合わせて検証した。

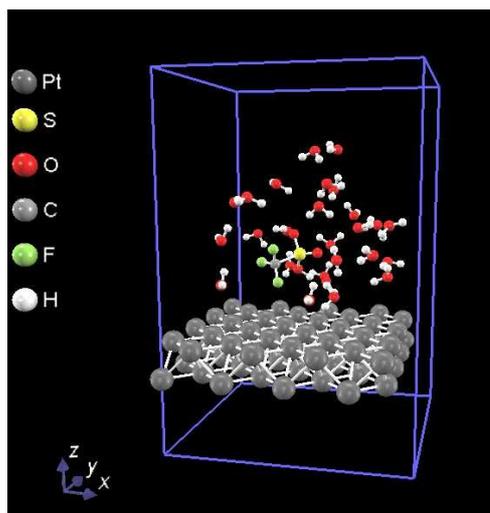


図 1 白金表面と TfOH と水のモデル

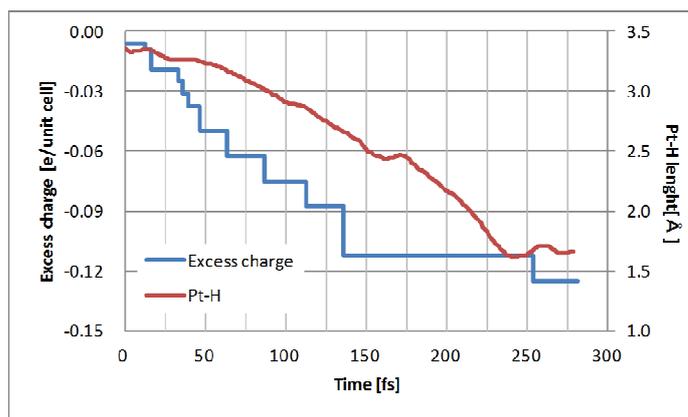


図 2 白金と水素の距離及び電荷ドープ量の変化

<sup>1</sup> M. Otani and O. Sugino: Phys. Rev. B **73**, 115407 (2006)