



第196回触媒化学研究センター談話会

講演者: 小林 久芳 先生

(京都工芸繊維大学工学部物質工学科・教授)

演 題: 燃料電池アノード反応および標準電極電位の密度汎関数法による計算化学的研究

日 時: 2005年11月15日(火) 15:30 - 17:00

会 場: 北海道大学創成科学研究棟 04-215

要 旨:

水素やメタノールを燃料とする固体高分子型燃料電池では、電極のCO被毒が重要な問題であり、既にPt-Ru合金が優れていることが実験サイドから報告されている。本研究では2元合金表面をモデル化した種々のクラスターモデルを用いて、COおよびH₂分子吸着を計算し、「COの吸着エネルギーが純Ptよりも小さく、吸着H₂のH-H結合解裂の活性化エネルギーが純Ptよりも大きくなる」という条件から、合金触媒の評価を行い、Pt-Ru合金が優れていることを再確認すると共に、新しい合金触媒の提案を行った。次に2元合金系において、どちらの元素がより表面に析出しやすいかを、2次元周期モデル計算を行い調べた。3番目に電極表面で進行するCO酸化に関する4つの素反応について、純Pt金属とPt-Ru合金上での比較を行い、2元機能説を計算化学の立場で検証した。

標準電極電位は電気化学の基本量であるにもかかわらず、複雑な過程であるとして今まで計算化学では扱われなかった。演者らは、Born-Haberサイクルを用いた簡単な計算法で、金属や有機分子、金属錯体の標準電極電位を計算し、比較的よい一致を得た。

《連絡先》 北大触媒化学研究センター 機能材料設計分野
上田 渉 (011-706-9164)