

---

## 2008年度冬学期 第5回 物性セミナー

---

### 「水 / 白金界面における電気化学反応と構造の 第一原理分子動力学シミュレーション」

講師 大谷 実 氏 (産総研)

日時 2008年 12月 5日 (金) 午後 4時 30分 ~

場所 16号館 827

固体と液体の界面における電気化学反応とは、固液界面で起こる電子の授受を伴う酸化還元反応である。水の電気分解による酸素・水素の発生、燃料電池や2次電池など我々の身近に存在する反応であると同時に、工業的にも非常に重要な反応である。効率よく電気エネルギーを取り出したり、蓄えるには固液界面で起こっている反応の素過程を正しく理解し、反応を促進・抑制している要素を見出す必要がある。しかし、原子・分子レベルでの電極反応の理解はほとんどなされていないのが現状である。これは、固相と液相という相境界で起こる電子移動反応をシミュレートする事が困難であるという点に加えて、電圧を印加した固液界面に存在する、特徴的な反応場（電気二重層）を適切にモデリングし、第一原理計算を行う方法が確立していないことが原因である。我々のグループではこの困難を克服し、第一原理計算を用いて電気化学反応を直接シミュレートする方法を開発した [1]。講演では、方法論の詳細を説明し、第一原理計算から観た電極反応のミクロスコピックな反応メカニズムを紹介する [2-4]。

#### 参考文献

- [1] M. Otani and O. Sugino: Phys. Rev. B 73 (2006) 115407.
- [2] O. Sugino, I. Hamada, M. Otani, Y. Morikawa, T. Ikeshoji and Y. Okamoto: Surf. Sci. 601 (2007) 5237.
- [3] M. Otani, I. Hamada, O. Sugino, Y. Morikawa, Y. Okamoto and T. Ikeshoji: J. Phys. Soc. Jpn. 77 (2008) 024802.
- [4] M. Otani, I. Hamada, O. Sugino, Y. Morikawa, Y. Okamoto and T. Ikeshoji: Phys. Chem. Chem. Phys. 25 (2008) 3609.

#### 今後の予定：

冬学期の物性セミナーの予定は下記のWEB ページで公開しております。

12月19日 青木 正直 氏 (UCLA 名誉教授)

Non-self averaging phenomena in macroeconomics(仮)

2月13日 大川祐司氏 (東大駒場・素粒子)

TBA

物性セミナーのページ：

「駒場 物性セミナー」で検索!

<http://huku.c.u-tokyo.ac.jp/cgi-bin/Fswiki/wiki.cgi/BusseiSeminar>

物性セミナー世話人： 加藤雄介， 福島孝治， 義口友紀， 堺 和光， 猪野和住

問い合わせ先 (福島) ex. 46513