

Pt 表面触媒反応における溶媒効果の第一原理計算

産総研 大谷 実

minoru.otani@aist.go.jp

燃料電池や光触媒など触媒反応を用いるデバイスにおいて、触媒の表面積を広げて反応領域を拡大することは大きな課題である。近年では、ナノ粒子を作成することにより、反応領域を増やす試みがなされており、ナノ構造による触媒反応性の違いなどが注目されている。本研究で取り上げる燃料電池などの電気化学系のデバイスでは、電極電位の揺らぎが触媒反応に影響を与える可能性があり、より複雑である。Krischerらはナノ構造の触媒において、この電極電位の揺らぎが触媒反応性を向上することを見出している[1]。その原因として、酸化還元反応における電子移動に伴う電位の揺らぎが、触媒反応性の向上をもたらしていると結論されているが、まだ完全には理解されていない。本研究[2]では、Krischerらとは別の視点から、極性溶媒の熱揺らぎに注目して、速度論を適用することにより電極電位の揺らぎによる触媒反応性の向上に関して考察する。

参考文献

- [1] V. Garcia-Morales and K. Krischer; *J. Chem. Phys.*, **134**, 244512 (2011).
- [2] N. Bonnet, O. Sugino, and M. Otani; *J. Chem. Phys.*, **140**, 044703 (2014).