

電気化学界面の第一原理シミュレーション

杉野 修

東京大学物性研究所

計算科学の分野で電気化学界面のシミュレーションが、最近特に注目されている。その理由は、エネルギー変換への関心が高まっているということだけでなく、シミュレーション技術が急速に整ってきたこと、さらに、シミュレーション結果を比較できる実験が行われ始めたことによる。そのためアカデミックな興味から、電気二重層の構造の詳細や電気化学反応の動力学に対する研究が行われ始めている。この状況下で、理論計算がどこまで進んでいるのか、何をどの程度明らかにし得るのかを知ることは重要と考えられる。本講演ではこの点に注目して話題提供を行う。

発表者は以前から、電位が印加された電極界面をどのようにモデリングするかに関して研究を行い、遠方の水溶液を連続体で近似する方法(有効遮蔽体法 ESM)を開発した。この方法をさらに発展させ、電位を制御しながら計算を行うためのアルゴリズムの開発も行ってきた。その結果、白金表面における水素や酸素分子の酸化還元反応の詳細を明らかにすることが可能になった(下記の参考文献を参照されたい)。本講演では、その事例紹介をまず行う。続いてこの種の計算の問題点を明らかにし、その問題点をクリアするために各地で行われている取り組みについて紹介する。この結果に基づき、これからどのように理解が進もうとしているのか、実験とのコラボレーションはどのように進もうとしているのか、それらの可能性について議論する。

参考文献

- [1] M. Otani and O. Sugino, Phys. Rev. B 73, 115407 (2006).
- [2] N. Bonnet, T. Morishita, O. Sugino, and M. Otani, Phys. Rev. Lett. 109, 266101 (2012).
- [3] M. Otani, I. Hamada, O. Sugino, Y. Morikawa, Y. Okamoto, and T. Ikeshoji, J. Phys. Soc. Jpn. 77, 024802 (2008)
- [4] Y. Okamoto and O. Sugino, J. Phys. Chem. C 114, 4473(2010).
- [5] N. Bonnet, M. Otani and O. Sugino, J. Phys. Chem. C 118, 13638 (2014).