

分子動力学法を用いたシンタリング現象解析

○中尾和英^{1,2}、濱武由美³、河野晴彦^{2,3}、石元孝佳^{2,3}、古山通久^{1,2,3,4}

¹九州大学大学院工学府水素エネルギーシステム専攻
(〒819-0395 福岡市西区元岡744)

²JST-CREST (〒102-0076 東京都千代田区五番町7 K's五番町)

³九州大学稲盛フロンティア研究センター (〒819-0395 福岡市西区元岡 744)

⁴九州大学カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所
(〒819-0395 福岡市西区元岡 744)

【緒言】

燃料電池電極を構成する金属微粒子のシンタリングによる性能低下は燃料電池の耐久性にとって重大な問題である。金属微粒子のシンタリング挙動は担体や動作環境に影響されると考えられるが、これを実験から明らかにすることは容易ではない。そのため、原子スケールでのシミュレーションによる解析がより詳細なシンタリング予測にとって重要となる。本研究では、Ni多孔体や担体上での金クラスターのシンタリング現象の解析を分子動力学法により行った。

【方法】

計算には分子動力学プログラムLAMMPS を使用した。計算モデルには、Ni多孔体、グラファイト・チタニア及びチタニアナノチューブ上に担持された金ナノクラスターを用いた。Ni間はMishinらによるEAMポテンシャル、グラファイト内にはErhartとAlbeによる Tersoffポテンシャル、グラファイト層間にはMaibaumとChandlerによるLJポテンシャル、Au間はZhouらによるEAMポテンシャル、C-Au間にはLuedtkeとLandmanによるLJポテンシャル、チタニアにはShanらによるCOMBポテンシャル、Ti-Au間とO-Au間には独自にパラメータを決定したMorseポテンシャルを用いた。また、多孔体のシンタリング特性の解析をマスターシンタリングカーブ(MSC)[1]の構築によって行った。

【結果】

図1に1辺15.0 nmのセル内に粒径7.5 nmのNi粒子をパッキングした多孔構造に対する分子動力学シミュレーションによって構築したMSCを示す。このMSCは初期密度を変化させた複数のモデルの密度変化挙動の足し合わせによって構築した。MSCを構築する際に約100 kJmol⁻¹というシンタリングの活性化エネルギーを得ることができた。実験では108 kJmol⁻¹という値が報告されている[2]ことから、今回得られた活性化エネルギーの値は妥当な結果であると考えられる。担持触媒のシンタリングに関する計算結果は当日報告を行う。

【謝辞】

本研究の一部は日本学術振興会特別研究員奨励費の助成を受けて行われた。また、九州大学稲盛フロンティア研究センターの研究活動は京セラ(株)の支援により行われた。関係各位に感謝する。

【参考文献】

[1] H. Su et al., *J. Am. Ceram. Soc.*, **79**, 3211 (1996).

[2] D. C. Blaine et al., *Metall. Mater. Trans. A*, **37**, 2827 (2006).

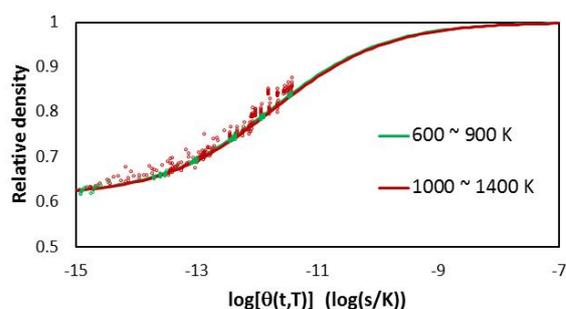


図1 Ni多孔構造の分子動力学シミュレーションの結果から構築されたMSC