

## アルカリ形燃料電池電解質中での OH<sup>-</sup>ダイナミクスと溶媒効果

○石元孝佳<sup>1</sup>、古山通久<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>九州大学稲盛フロンティア研究センター

<sup>2</sup>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】

エタノールやグルコースなどのバイオ燃料を直接利用した燃料電池は水素製造を必要とせず、バイオマスを用いて得られる燃料をそのまま使用できるという利点がある。近年の研究でアルカリ溶液を電解質として使用したアルカリ形燃料電池(AFC)で高いエタノール酸化能を有することが実験により示された[1]。また、アルカリ環境下にある金属触媒は OH<sup>-</sup>により被覆されている可能性も示唆されている[2]。これらの結果は、酸性条件で動作する固体高分子形燃料電池とは異なり、アルカリ溶液が電極反応に大きな影響を及ぼしていることを意味している。また、金触媒上でのグルコース酸化反応においてアルカリ溶液中の OH<sup>-</sup>が直接反応に関与することによりグルコン酸がスムーズに生成することを見出した[3]。AFC の高性能化のためには電極反応はもちろんのこと、アルカリ環境での溶液構造や局所構造を理解することが不可欠である。本研究では、量子化学計算を用いて、OH<sup>-</sup>を含んだ水和クラスターの構造や拡散挙動の解析を行った。

### 【方法】

本研究では、水和構造の詳細を解析するために、プロトンの量子効果を頭に考慮した多成分分子軌道(MC\_MO)法を使用した。MC\_MO 計算における溶媒効果の取り込みを実現するために、本研究ではPCM法を組み込んだMC\_MO法を量子化学計算プログラムである GAMESS に実装した。電子の基底関数には 6-31G\*\*、プロトンの基底関数には[1s]GTFを用いて B3LYP レベルでの MC\_MO 計算を実行した。

### 【結果】

アルカリ溶液中の局所水和構造を解析するために溶媒効果を考慮した MC\_MO 計算を実行し、水クラスターとの違いについて解析した。図 1 には得られた安定構造の一例を示す。H<sub>2</sub>O のみならず D<sub>2</sub>O 溶液中の局所安定構造の解析にも現在取り組んでいる。また、ナノサイズの液滴モデルにおける水やイオン種の動径分布関数や拡散係数を解析するために非経験的分子動力学計算を実行している。結果の詳細は当日報告する。

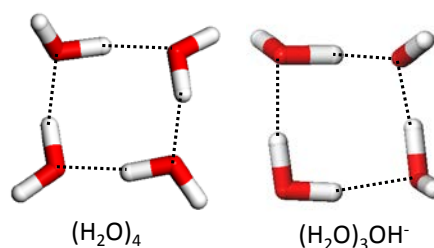


Fig.1 Cyclic hydrogen bond network of (H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub> and (H<sub>2</sub>O)<sub>3</sub>OH<sup>-</sup> cluster models.

### 【謝辞】

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。また本研究の一部は「産学官地域連携による水素実証研究」および科研費(25709012)の助成により行われた。関係各位に感謝する。

### 【参考文献】

- [1] Y. Kwon, S. C. S. Lai, P. Rodriguez, and M. T. M. Koper, *J. Am. Chem. Soc.*, **133**, 6914 (2011).  
 [2] P. Rodriguez, Y. Kwon, and M. T. M. Koper, *Nat. Chem.*, **4**, 177 (2011).  
 [3] T. Ishimoto, H. Kazuno, T. Kishida, and M. Koyama, *J. Phys. Chem. C*, in preparation.