

膜・電極複合体に関する マルチスケールシミュレーション



望月 祐志 (もちづき ゆうじ)

立教大学理学部
教授

研究
分野

計算化学・理論化学

膜・電極複合体は、化学反応によって電気エネルギーを取り出す燃料電池の中でナノ～メゾの領域の基幹部品として位置付けられる。構成要素としては、電解質膜（ナフィオン等）と白金触媒、炭素素材電極、それに付帯する水（伝導性プロトン含む）があり、高い性能を達成するには各要素が協奏的に機能することが重要である。そして、合理的な設計を行うためには、対象系に関する電子・原子レベルからの理解が求められている。これまでも、実験的な研究を相補する意図で理論・シミュレーションによる研究が行なわれてきた。しかし、これらの計算の中では系の複雑さ故に経験的パラメータが使われることも多く、設計ツールとして広範囲の適用性や信頼性を担保するには至っていない。

こうしたことから、私たちは膜・電極複合体に関する化学反応や相互作用を電子・原子レベルで詳細に理解し、有効パラメータを非経験的に算定する試みを進めている。手法的には、フラグメント分子軌道法(FMO)を主に電解質膜系に、また密度汎関数法(DFT)を白金クラスター・炭素系に用いている。さらに、これらのデータをベースにメゾレベルの粗視化シミュレーションも併せて行い、マルチスケールな計算のワークフローを確立することを目指している。

本発表では、FMO計算/DFT計算に基づくナノレベルでの詳細解析と有効相互作用パラメータ算出の実際のプロトコルについて説明し、超並列計算との親和性を示す。また、代表的なメゾレベルの計算手法である散逸粒子動力学(DPD)のシミュレーション結果を紹介する。最後に、当該分野の設計ツールとしての発展の可能性、システムとしてのまとめ上げの方向についても触れる。